

温度制御型エネルギー増幅機能を有する二次元/三次元ハイブリッド半導体構造及びその応用（特願2025-069364、出願人：New York General Group, Inc.、発明者：村上 由宇）

New York General Group
2025

1. 発明の名称

温度制御型エネルギー増幅機能を有する二次元/三次元ハイブリッド半導体構造及びその応用

2. 要約

【課題】単層MoS₂/バルクInSeヘテロ接合構造において、特定温度範囲での負の熱消光効果を制御し、発光特性を選択的に増強する技術を提供する。

【解決手段】単層MoS₂とバルク γ -InSeの間に電子-フォノン結合増強中間層（厚さ0.5nmのAl₂O₃層）と表面処理層（セレン蒸着層）を導入し、マイクロヒーターと極低温冷却装置を組み合わせた温度制御機構を備えた構造を開発した。この構造は30Kから80Kの温度範囲で負の熱消光効果を示し、温度上昇とともに発光強度が増加する。温度係数は0.7%/Kに向上し、発光強度の温度応答性が従来構造の2倍以上となる。これにより、0.05K未満の温度分解能を持つ高感度温度センサや、10ms未満の応答時間を持つ光スイッチなどの新規デバイスが実現可能となる。

3. 技術分野

本発明は、二次元材料と三次元材料のヘテロ接合構造に関し、特に温度制御により発光特性を選択的に増強できる単層遷移金属ダイカルコゲナイド層と多層インジウムセレン層を組み合わせた垂直ヘテロ接合構造及びそれを用いた温度センサ、光スイッチ、量子光源、熱電変換デバイスなどの応用に関する。より具体的には、本発明は、特定の温度範囲において負の熱消光効果を示し、温度変化に対して高感度に応答する二次元/三次元ハイブリッド半導体構造に関するものである。

4. 背景技術

二次元材料と三次元材料のヘテロ接合構造は、次世代の電子デバイスや光電子デバイスの開発において重要な役割を果たしている。特に、遷移金属ダイカルコゲナイド（TMD）などの二次元半導体材料は、その特異な電子的・光学的特性から、様々な応用が期待されている。二次元TMDは、層数に依存したバンドギャップを持ち、単層では直接バンドギャップ半導体となるため、効率的な光吸収や発光が可能である。また、強いスピン軌道相互作用や谷物理などの特異な物性を示すことから、スピントロニクスや谷エレクトロニクスなどの新しい応用分野も開拓されている。

一方、インジウムセレン（InSe）は、層状構造を持つ半導体材料であり、高い電子移動度（1000 cm²/Vs以上）と、層数に依存して変化する直接バンドギャップを有している。バルクInSeは約1.3eVの直接バンドギャップを持ち、近赤外領域での光吸収や発光が可能である。また、InSeは層数の減少に伴いバンドギャップ

プが増大し、単層では約2.4eVとなることが知られている。これらの特性から、InSeは高性能かつ低消費電力の電子デバイスや光電子デバイスへの応用が期待されている。

近年、単層MoS₂とバルクInSeを組み合わせたヘテロ接合構造が研究され、タイプI型バンドアライメントを形成し、MoS₂からInSeへの効率的なエネルギー転移が生じることが報告されている。Altwater等の研究 (npj 2D Materials and Applications 9, 31 (2025)) では、単層MoS₂/バルクInSeヘテロ接合構造において、MoS₂からの発光が92% (室温) から99% (4K) 抑制される一方、InSeからの発光が最大で44倍増強されることが報告されている。また、MoS₂層がInSe表面を不活性化し、特に低温 (60K以下) では、InSeの欠陥による発光抑制効果が大幅に軽減されることも報告されている。

しかしながら、この系における温度依存的な光学特性の制御や、それを利用した新規デバイスの開発については十分に研究されていない。特に、30Kから80Kの温度範囲において観測される負の熱消光効果 (温度上昇とともに発光強度が増加する現象) のメカニズムや、その応用可能性については詳細な検討がなされていない。また、電子-フォノン結合の制御や表面欠陥密度の最適化による発光特性の向上についても、さらなる研究が必要とされている。

5. 発明が解決しようとする課題

先行研究では、単層MoS₂/バルクInSeヘテロ接合構造において、低温 (60K以下) でInSeからの発光が大幅に増強されることが報告されているが、この現象を積極的に制御し、実用的なデバイスに応用する技術は確立されていない。特に、以下の課題が存在する。

1. 温度依存的な発光増強効果のメカニズムが十分に解明されておらず、最適な構造設計が困難である。
2. 電子-フォノン結合や表面欠陥密度などのパラメータを制御することで、発光特性をさらに向上させる方法が確立されていない。
3. 負の熱消光効果を示す温度範囲 (30Kから80K) が限定的であり、より広い温度範囲での応用が困難である。
4. 温度変化に対する発光応答の感度や応答速度が不十分であり、高性能な温度センサや光スイッチへの応用が制限されている。
5. 量子光源や熱電変換デバイスなどの新しい応用分野への展開が検討されていない。

本発明は、これらの課題を解決するために、単層遷移金属ダイカルコゲナイド層と多層インジウムセレン層を組み合わせた垂直ヘテロ接合構造において、温度制御により発光特性を選択的に増強する技術を提供することを目的とする。さらに、電子-フォノン結合増強中間層や表面処理層を導入することで、発光特性をさらに向上させる方法を提供することを目的とする。また、この温度依存的な発光増強効果を利用した新規デバイス、特に高感度温度センサ、光スイッチ、量子光源、熱電変換デバイスなどを提供することを目的とする。

6. 課題を解決するための手段

本発明者らは、単層MoS₂とバルク γ -InSeを組み合わせた垂直ヘテロ接合構造において、温度に依存した発光増強効果を詳細に調査した。その結果、特定の温度範囲 (30Kから80K) において、InSeの欠陥による発光抑制効果とMoS₂による表面不活性化効果が複雑に相互作用し、温度変化に対して高感度な発光応答を示すことを見出した。特に、30Kから80Kの温度範囲では、温度上昇とともに発光強度が増加するという負の熱消光効果が観測された。

本発明者らは、この負の熱消光効果のメカニズムを詳細に解析し、以下の知見を得た。

1. InSeの欠陥準位（主にセレン空孔や酸素不純物に起因）に捕獲された励起子が、温度上昇とともに熱的に解放され、自由励起子として再結合することで発光が増強される。
2. MoS₂層はInSe表面を不活性化するだけでなく、表面近傍の電場分布を変調し、欠陥準位からの励起子解放を促進する効果がある。
3. 電子-フォノン結合の強さが、励起子の捕獲・解放過程に大きく影響し、特定のフォノンモードとの結合が強い場合に負の熱消光効果が顕著になる。

これらの知見に基づき、本発明者らは以下の技術的手段を開発した。

1. 温度制御機構の導入：ペルチェ素子、マイクロヒーター、極低温冷却装置、または熱電対などを用いて、構造の温度を30Kから80Kの範囲で±0.1K以内の精度で制御する技術を開発した。これにより、InSeからの発光強度を選択的に制御することが可能となった。
2. 電子-フォノン結合増強中間層の導入：単層MoS₂とバルクInSeの間に、原子層堆積法により形成された厚さ0.1nmから1.0nmの絶縁体層（Al₂O₃、HfO₂、ZrO₂、またはh-BN）を導入した。この中間層は、電子的結合を弱めることなく、特定のフォノンモードとの結合を選択的に増強する効果があり、負の熱消光効果の温度係数を0.5%/K以上に向上させることに成功した。
3. 表面欠陥密度の制御：InSe表面に、セレン原子の欠損を補償するためのセレン蒸着層、または酸素不純物を低減するための還元処理層を導入した。これにより、欠陥準位の密度と分布を最適化し、負の熱消光効果の温度範囲を拡大することに成功した。

これらの技術を組み合わせることで、30Kから80Kの温度範囲において、温度変化に対して高感度に応答する発光特性を持つ垂直ヘテロ接合構造を実現した。この構造は、0.05K未満の温度分解能を持つ高感度温度センサや、10ms未満の応答時間を持つ光スイッチ、 $g^{(2)}(0)$ 値が0.1未満の高純度単一光子源、効率的な熱電変換デバイスなどの新規デバイスへの応用が可能である。

7. 発明の効果

本発明の温度応答性垂直ヘテロ接合構造は、以下の効果を有する。

1. 温度制御による発光強度の選択的増強：温度制御機構により、InSeからの発光強度を選択的に増強できる。特に30Kから80Kの温度範囲では、温度変化に対して高感度な発光応答を示し、温度が1K変化するごとに発光強度が0.5%以上変化する。これにより、従来の半導体温度センサと比較して約10倍の感度向上が実現される。
2. 負の熱消光効果の増強：電子-フォノン結合増強中間層の導入により、負の熱消光効果の温度係数が0.5%/K以上に向上する。これにより、温度上昇とともに発光強度が増加するという、通常の半導体とは逆の挙動を示す温度範囲が拡大され、新しい動作原理に基づくデバイスの開発が可能となる。
3. 表面欠陥密度の最適化：表面処理層の導入により、InSe表面の欠陥密度と分布を最適化し、負の熱消光効果の温度範囲を拡大することができる。これにより、より広い温度範囲での応用が可能となる。
4. 高性能デバイスへの応用：本発明の構造は、0.05K未満の温度分解能を持つ高感度温度センサ、10ms未満の応答時間を持つ光スイッチ、 $g^{(2)}(0)$ 値が0.1未満の高純度単一光子源、効率的な熱電変換デバイスなどの新規デバイスへの応用が可能である。特に、量子コンピューティングや超伝導デバイスなどの極低温環境で動作するシステムにおいて、重要な役割を果たすことが期待される。

5. 製造プロセスの簡便性：本発明の構造は、従来の半導体製造プロセスと互換性のある方法で作製可能であり、大量生産にも適している。特に、原子層堆積法による中間層の形成や、表面処理層の導入は、既存の製造設備を用いて実現可能である。

8. 発明を実施するための形態

本発明の最良の実施形態は、電子-フォノン結合増強中間層（厚さ0.5nmのAl₂O₃層）と表面処理層（セレン蒸着層）を持つ単層MoS₂/バルク γ -InSe垂直ヘテロ接合構造であり、マイクロヒーターと極低温冷却装置を組み合わせた温度制御機構を備えたものである。以下、本発明の構造、製造方法、動作原理および応用について詳細に説明する。

本発明の構造は、複数の機能層から構成される精密な積層構造を有する。最下層には、熱伝導性と機械的安定性に優れたサファイア基板（厚さ430 μ m、直径50.8mm、(0001)面）を使用する。サファイア基板は、極低温環境における熱収縮の影響を最小限に抑えるために、あらかじめ350°Cで12時間のアニーリング処理を施し、内部応力を緩和させる。サファイア基板には、電子ビームリソグラフィとリフトオフプロセスにより、精密に設計されたマイクロヒーターパターンを形成する。

マイクロヒーターパターンは、チタン (Ti) と金 (Au) の二層構造 (Ti/Au, 5nm/50nm) から成り、中央部に10 μ m \times 10 μ mの正方形領域を設け、その周囲に幅2 μ mのジグザグパターンを配置する。このジグザグパターンは、熱分布の均一性を確保するために、コンピュータシミュレーションに基づいて最適化されており、中央部の温度分布の均一性は ± 0.05 K以内に制御される。マイクロヒーターの電気抵抗は室温で約50 Ω であり、4Kから100Kの温度範囲では約30 Ω から45 Ω まで変化する。この抵抗変化は温度のモニタリングにも利用可能であり、電流-電圧特性から温度を ± 0.2 K以内の精度で推定することができる。

マイクロヒーターパターンの上には、プラズマ化学気相成長法 (PECVD) により、厚さ200nmのSiO₂熱絶縁層を形成する。SiO₂層の形成条件は、シラン (SiH₄) と亜酸化窒素 (N₂O) の混合ガス (流量比1:20) を用い、圧力300mTorr、RF電力150W、基板温度300°Cで堆積する。この条件下で形成されたSiO₂層は、熱伝導率が約1.1W/(m \cdot K)と低く、優れた熱絶縁性を示す。また、表面粗さはRMS値で0.3nm以下であり、後続の層の形成に適した平滑な表面を提供する。

SiO₂熱絶縁層の上には、バルク γ -InSe結晶（厚さ100 μ m以上）を配置する。InSe結晶は、垂直ブリッジマン法により高純度に成長させたものを使用する。具体的には、非化学量論的な多結晶In_{1.04}Se_{0.96}を原料とし、高純度グラファイト処理を施した石英アンブル（内径12mm、長さ150mm）内に真空封入（10⁻⁶Torr以下）する。原料の総量は約15gとし、アンブル内の空間を最小限に抑えることで、セレンの蒸気圧による影響を制御する。溶融物を720°Cで12時間平衡化させた後、アンブルを温度勾配（約10°C/cm）に沿って0.5mm/hの速度で移動させることで結晶を成長させる。成長後の結晶は、アンブル内で650°Cから室温まで約50時間かけて徐冷し、熱応力による欠陥の発生を抑制する。

得られたInSe結晶は、X線回折 (XRD) と透過電子顕微鏡 (TEM) 測定により γ 相であることを確認する。XRD測定では、Cu-K α 線 ($\lambda=1.5418\text{\AA}$) を用い、 $2\theta=10^\circ$ から 80° の範囲でスキャンを行う。主要な回折ピークは $2\theta=12.6^\circ$ 、 25.4° 、 38.4° に観測され、これらは γ -InSeの(002)、(004)、(006)面からの回折に対応する。また、TEM観察では、格子間隔が約8.32 \AA の層状構造が確認され、これも γ 相InSeの特徴と一致する。さらに、エネルギー分散型X線分光法 (EDX) による組成分析では、In:Se比が 1.1 ± 0.02 の範囲内にあり、化学量論的組成であることが確認される。

InSe結晶は、導電性エポキシ樹脂（銀ペースト）を用いてSiO₂熱絶縁層上に固定する。接着面積は約1mm \times 1mmとし、結晶の熱膨張による応力を緩和するために、エポキシ樹脂の層厚を約10 μ mに制御する。接

着後、エポキシ樹脂を120°Cで2時間硬化させ、機械的強度を確保する。固定されたInSe結晶は、マイクロメーターヘッドを備えた精密劈開装置を用いて表面を劈開し、新鮮かつ平滑な表面を露出させる。劈開は、アルゴン充填グローブボックス（O₂とH₂O濃度が0.1ppm未満）内で行い、表面の酸化や汚染を防止する。

劈開したInSe表面には、表面欠陥密度を制御するための表面処理層を形成する。表面処理層は、セレン原子の欠損を補償するためのセレン蒸着層であり、分子線エピタキシー（MBE）装置を用いて形成する。MBE装置の到達真空度は 5×10^{-11} Torrであり、成膜チャンバー内の残留ガス分析計（RGA）により、水、酸素、炭化水素などの不純物ガス濃度を常時モニタリングする。セレン源には高純度セレン（純度99.9999%）を用い、クヌーセンセル内に充填する。クヌーセンセルの温度は、PID制御により $\pm 0.1^\circ\text{C}$ 以内の精度で制御される。

セレン蒸着の条件は、セレン源温度170°C、基板温度100°C、蒸着時間60秒とする。この条件下でのセレン蒸着速度は約0.5Å/分であり、60秒の蒸着で厚さ約0.5nmのセレン層が形成される。蒸着速度は、事前に水晶振動子マイクロバランス（QCM）を用いて校正し、 $\pm 5\%$ 以内の精度で制御する。セレン蒸着後の表面は、原子間力顕微鏡（AFM）により評価し、表面粗さがRMS値で0.2nm以下であることを確認する。このセレン蒸着層は、InSe表面のセレン空孔を補償し、欠陥密度を約80%低減する効果がある。欠陥密度の低減は、X線光電子分光法（XPS）によるSe 3d光電子ピークの解析から推定される。

セレン蒸着層の上には、電子-フォノン結合を増強するための中間層を形成する。中間層は、原子層堆積法（ALD）により形成された厚さ0.5nmのAl₂O₃層である。ALD装置には、Picosun R-200アドバンスト原子層堆積システムを使用する。ALD反応チャンバーは、使用前に350°Cで12時間のベーキング処理を行い、内壁に吸着した水分や有機物を除去する。反応チャンバー内の真空度は、ターボ分子ポンプにより 10^{-6} Torr以下に維持される。

Al₂O₃層の形成には、トリメチルアルミニウム（TMA、Al(CH₃)₃）と水（H₂O）を前駆体として使用する。TMAは-10°Cに冷却したステンレス製容器内に保存し、蒸気圧を安定化させる。水は18.2MΩ·cmの超純水を用い、複数段のガス精製フィルターを通して不純物を除去する。ALD反応サイクルは、(1)TMAパルス（0.1秒）、(2)アルゴンパージ（10秒）、(3)水パルス（0.1秒）、(4)アルゴンパージ（10秒）の4ステップから構成される。キャリアガスには高純度アルゴン（純度99.9999%）を用い、流量は200sccmに設定する。基板温度は150°Cとし、 $\pm 0.5^\circ\text{C}$ 以内の精度で制御する。

1サイクルあたりの堆積厚さは約0.1nmであり、5サイクルの堆積を行うことで、厚さ0.5nmのAl₂O₃層を形成する。ALD成長中の膜厚は、その場測定可能な分光エリプソメトリーにより実時間でモニタリングし、目標厚さに達した時点で成長を終了する。形成されたAl₂O₃層の厚さと均一性は、X線反射率（XRR）測定により評価する。XRR測定は、Cu-Kα線（ $\lambda=1.5418\text{\AA}$ ）を用い、入射角 0.1° から 5.0° の範囲で行う。測定データをフィッティング解析することで、膜厚 $0.51 \pm 0.02\text{nm}$ 、密度 $3.2 \pm 0.1\text{g/cm}^3$ 、界面粗さ $0.15 \pm 0.05\text{nm}$ と決定される。

この中間層は、MoS₂とInSe間の電子的結合を弱めることなく、特定のフォノンモードとの結合を選択的に増強する効果がある。具体的には、Al₂O₃層の導入により、InSeの低エネルギーフォノンモード（約 15.5cm^{-1} 、約 40.2cm^{-1} ）とMoS₂の電子状態との結合が増強される。この効果は、温度依存ラマン分光測定により確認され、Al₂O₃層の導入により、これらのフォノンモードの温度依存性が約2倍に増大することが観測される。

Al₂O₃中間層の上には、単層MoS₂を転写する。MoS₂層は、バルク結晶（2D Semiconductors社製、純度99.995%）からの機械的剥離法により作製する。バルク結晶から単層MoS₂を効率的に剥離するために、以下の最適化された手順を用いる。まず、バルク結晶を青色ニトリルゴム製粘着テープ（Nitto社製、SPV-224P）に貼り付け、テープを折り返して10回程度剥離を繰り返す。次に、テープ上のMoS₂フレイクをポリジメチル

シロキサン（PDMS、Dow Corning社製、Sylgard 184）スタンプに転写する。PDMSスタンプは、シリコーン樹脂と硬化剤を10:1の重量比で混合し、真空デシケーター内で30分間脱泡した後、80°Cで2時間硬化させて作製する。厚さは約2mmとし、表面粗さはRMS値で0.5nm以下に制御する。

PDMS上のMoS₂フレイクは、光学顕微鏡（Olympus社製、BX53M）を用いて観察し、光学コントラストにより単層領域を識別する。単層MoS₂は、緑色光（波長約550nm）の照明下で、SiO₂（厚さ285nm）/Si基板上では紫色に見え、PDMS上では薄い青色に見える。この光学コントラストの違いは、基板との多重反射による干渉効果に起因する。単層の判定精度を向上させるために、複数の波長（470nm、550nm、630nm）での観察を行い、各波長でのコントラスト比を理論値と比較する。

選択した単層MoS₂フレイク（面積約20μm×20μm）を含むPDMSスタンプを、マイクロマニピュレーターを備えた転写装置に取り付ける。この転写装置は、xyz三軸の位置制御が0.1μm以下の精度で可能であり、回転機構も備えている。Al₂O₃層上への転写は、アルゴン充填グローブボックス内（O₂とH₂O濃度が0.1ppm未満）で行う。PDMSスタンプを徐々にAl₂O₃層に接触させ、接触面積が最大になった時点でPDMSを徐々に剥離する。この際、基板温度を40°Cに加熱することで、MoS₂とAl₂O₃間のファンデルワールス相互作用を促進し、転写効率を向上させる。転写後、構造全体を真空アニール（10⁻⁶ Torr、150°C、2時間）し、界面の残留水分や有機物を除去する。

転写されたMoS₂層は、ラマン分光測定により単層であることを確認する。測定には、共焦点ラマン顕微鏡（Renishaw社製、inVia Reflex）を使用し、514.5nmの励起レーザー（出力0.5mW、スポット径約1μm）を用いる。測定は、100倍の対物レンズ（NA=0.9）を通して行い、分光器の分解能は約0.5cm⁻¹に設定する。単層MoS₂のラマンスペクトルには、385.6cm⁻¹と407.7cm⁻¹にピークが観測され、これらはそれぞれE_{2g}¹モード（面内振動）とA_{1g}モード（面外振動）に対応する。これらのピーク間隔は22.1cm⁻¹であり、これは単層MoS₂の特徴的な値である。また、ピーク位置と半値全幅（FWHM）の空間マッピングを行い、転写されたMoS₂層全体にわたって均一な特性を持つことを確認する。

温度制御機構は、マイクロヒーターと極低温冷却装置を組み合わせたものである。極低温冷却装置には、Montana Instruments社製S200 Cryostationを使用する。この冷却装置は、2段式パルスチューブ冷凍機を採用しており、振動レベルが10nm以下と極めて低く、精密な光学測定に適している。また、温度制御範囲は4Kから350Kと広く、温度安定性は±10mK以内と優れている。試料室の真空度は10⁻⁷ Torr以下に維持され、試料の酸化や汚染を防止する。

試料は、アジャイル温度サンプルマウント（ATSM）に取り付けられる。ATSMは、抵抗ヒーターと温度センサー（シリコンダイオード温度計、精度±10mK）を内蔵しており、PID制御により±0.1K以内の精度で温度制御が可能である。マイクロヒーターは、電流値を制御することで、ATSMのベース温度（4K）から局所的に温度を上昇させることができる。具体的には、電流値を0mAから10mAまで変化させることで、構造の温度を4Kから100Kまで制御することができる。マイクロヒーターへの電流供給には、低ノイズ電流源（Keithley社製、Model 6221）を使用し、電流値を±0.1μA以内の精度で制御する。

温度分布は、赤外線サーモグラフィ（FLIR社製、X6580sc）を用いて可視化する。この装置は、波長3μmから5μmの中赤外領域で動作し、温度分解能は20mK、空間分解能は約5μmである。測定結果から、マイクロヒーター中央部の10μm×10μm領域内での温度均一性は±0.1K以内であることが確認される。また、温度の時間応答性を評価するために、マイクロヒーターに方形波電流（周波数1Hz）を印加し、温度変化を測定する。その結果、温度上昇時の応答時間（最終値の90%に達するまでの時間）は約3ms、温度下降時の応答時間は約5msであることが確認される。

本発明の構造の光学的特性を評価するために、フォトルミネッセンス（PL）測定を行う。PL測定には、チタンサファイアレーザー（Coherent社製、Mira 900）を光源として使用する。このレーザーは、波長可変

(700nmから1000nm)、パルス幅120fs、繰り返し周波数80MHzで動作し、第二高調波発生 (SHG) クリスタルを用いて波長を半分 (350nmから500nm) に変換することも可能である。本測定では、波長580nm (パルス幅約150fs、繰り返し周波数80MHz) に設定し、出力は1mWとする。

レーザー光は、0.75NAの対物レンズ (Olympus社製、MPLAPON50x) を通して試料に照射される。この対物レンズは、極低温環境での使用に適した長作動距離 (約4mm) を持ち、色収差が最小限に抑えられている。レーザースポットの直径は約1 μ mであり、励起密度は約10⁵ W/cm²となる。この励起密度は、InSeのAInSe励起子の飽和閾値 (約10⁶ W/cm²) よりも十分に低く、線形応答領域での測定が可能である。

発光は同じ対物レンズで集光され、ダイクロイックミラー (カットオフ波長600nm) を通過した後、長波長パスフィルター (カットオフ波長600nm) によりレーザー散乱光が除去される。発光スペクトルは、焦点距離750mmの回折格子分光器 (Princeton Instruments社製、SP-2750) により分散され、液体窒素冷却シリコンCCDカメラ (Princeton Instruments社製、PyLoN BRX) により検出される。分光器の回折格子は150本/mm (ブレイズ波長1.2 μ m) を使用し、波長範囲600nmから1200nm (約2.1eVから1.0eV) をカバーする。スペクトル分解能は約0.2nmである。

測定は、4Kから300Kの温度範囲で行い、特に30Kから80Kの範囲では1K刻みで詳細に測定する。各温度での測定前に、少なくとも30分間の温度安定化時間を設け、熱平衡状態での測定を確保する。また、レーザー照射による局所的な加熱効果を最小限に抑えるために、チョッパー (周波数1kHz、デューティサイクル50%) を用いてレーザーを断続的に照射する。

測定の結果、InSeからの発光は、主にA励起子 (AInSe、1.346eV)、P-バンド (1.334eV)、および欠陥関連発光 (1.315-1.33eV) の3つの成分から構成されることが確認される。これらの成分は、マルチローレンツ関数フィッティングにより分離・定量化される。温度が30Kから80Kに上昇するにつれて、AInSe励起子の発光強度が増加し、80K以上では通常の熱消光効果により減少に転じる。この負の熱消光効果は、MoS₂/InSe構造において特に顕著であり、裸のInSe表面と比較して最大44倍の発光増強が観測される。

負の熱消光効果の温度係数 (発光強度の温度変化率) は、以下の式で定量化される：

$$\alpha = (1/I)(dI/dT)$$

ここで、Iは発光強度、Tは温度、dI/dTは温度に対する発光強度の微分である。裸のInSe表面では、 $\alpha = 0.3\%/K$ であるのに対し、MoS₂/InSe構造では、 $\alpha = 0.5\%/K$ と大きくなる。さらに、電子-フォノン結合増強中間層 (Al₂O₃層) と表面処理層 (セレン蒸着層) を導入した構造では、 $\alpha = 0.7\%/K$ にまで向上する。

また、負の熱消光効果の温度範囲も拡大される。裸のInSe表面では、30Kから80Kの範囲でのみ負の熱消光効果が観測されるのに対し、MoS₂/InSe構造では、25Kから90Kの範囲に拡大する。さらに、電子-フォノン結合増強中間層と表面処理層を導入した構造では、20Kから100Kの範囲にまで拡大される。

負の熱消光効果のメカニズムを詳細に解析するために、温度依存PL測定に加えて、励起強度依存PL測定、時間分解PL測定、および温度依存ラマン分光測定を行う。

励起強度依存PL測定では、レーザー出力を0.1mWから10mWまで変化させ、各励起強度でのPLスペクトルを測定する。AInSe励起子の発光強度は、励起強度に対して線形に増加するのに対し、P-バンドの発光強度は励起強度の1.8乗に比例して増加する。この結果は、P-バンドが励起子-励起子散乱に起因することを示唆している。また、欠陥関連発光の強度は、励起強度に対してサブリニアな依存性 (約0.7乗) を示し、欠陥準位の飽和効果が観測される。

時間分解PL測定は、単一光子アバランシェダイオード (MPD社製、PDM-IR) とPicoQuant社製HydraHarp 400 イベントタイマーを用いて行う。システムの時間分解能は約50psである。より高い時間分解能を得るため

に、ユニバーサルストリークカメラ（Hamamatsu社製、C10910-04）も使用する。このカメラの時間分解能は約1psであり、超高速現象の観測が可能である。

測定の結果、AlInSe励起子の寿命は、裸のInSe表面では約0.45psであるのに対し、MoS2/InSe構造では約1.2psに延長されることが確認される。さらに、電子-フォノン結合増強中間層と表面処理層を導入した構造では、AlInSe励起子の寿命が約1.8psにまで延長される。これは、欠陥による非放射再結合が抑制されていることを示している。また、温度上昇に伴うAlInSe励起子の寿命変化を測定すると、30Kから80Kの範囲では温度上昇とともに寿命が延長されることが確認される。これは、欠陥準位に捕獲された励起子が熱的に解放され、自由励起子として再結合する確率が増加することを示唆している。

温度依存ラマン分光測定では、InSeの低エネルギーフォノンモード（約 15.5cm^{-1} 、約 40.2cm^{-1} ）の温度依存性を詳細に調査する。測定には、ボリュームホログラフィックフィルターを用いた超低波数ラマン分光システムを使用し、 5cm^{-1} 以下の低波数領域までの測定を可能にする。測定の結果、これらの低エネルギーフォノンモードの強度と線幅が、30Kから80Kの温度範囲で顕著な変化を示すことが確認される。特に、電子-フォノン結合増強中間層を導入した構造では、これらのフォノンモードの温度依存性が約2倍に増大することが観測される。これは、中間層の導入により、特定のフォノンモードとの結合が選択的に増強されていることを示している。

これらの測定結果と理論解析から、本発明の構造における負の熱消光効果のメカニズムは以下のように説明される。InSe結晶内には、セレン空孔や酸素不純物などに起因する欠陥準位が存在し、これらの欠陥準位は励起子を捕獲する。低温（30K以下）では、熱エネルギーが不足しているため、捕獲された励起子は欠陥準位に留まり、非放射再結合や欠陥発光として消失する。温度が上昇するにつれて（30Kから80K）、熱エネルギーにより欠陥準位から励起子が解放され、自由励起子として再結合する確率が増加する。これにより、AlInSe励起子の発光強度が増加する。さらに温度が上昇すると（80K以上）、フォノン散乱による非放射再結合が支配的になり、通常の熱消光効果により発光強度が減少する。

MoS2層の存在は、以下の3つの効果によりこのプロセスを促進する。第一に、MoS2層はInSe表面を不活性化し、酸素や水分による表面欠陥の形成を抑制する。第二に、MoS2からInSeへのエネルギー転移により、InSe内の励起子密度が増加し、欠陥準位の飽和が促進される。第三に、MoS2-InSe界面に形成される電場により、欠陥準位からの励起子解放が促進される。

電子-フォノン結合増強中間層（Al2O3層）の導入は、以下の2つの効果により負の熱消光効果を増強する。第一に、Al2O3層は、InSeの低エネルギーフォノンモードとMoS2の電子状態との結合を選択的に増強し、熱エネルギーによる欠陥準位からの励起子解放を促進する。第二に、Al2O3層は、MoS2とInSe間の電子的結合を最適化し、エネルギー転移効率を向上させる。

表面処理層（セレン蒸着層）の導入は、以下の2つの効果により負の熱消光効果の温度範囲を拡大する。第一に、セレン蒸着層は、InSe表面のセレン空孔を補償し、欠陥密度を低減する。これにより、より低温（20K）から欠陥準位からの励起子解放が始まる。第二に、セレン蒸着層は、InSe表面の電子状態を修飾し、欠陥準位のエネルギー分布を最適化する。これにより、より広い温度範囲（20Kから100K）で負の熱消光効果が観測される。

本発明の構造は、以下のような応用が可能である。

1. 高感度温度センサ：30Kから80Kの温度範囲において、InSeからの発光強度または発光スペクトルの変化を検出することにより、温度を高精度に測定することができる。具体的には、580nmのレーザー光を照射し、InSeからの発光（約1.3eV）の強度を測定することで、温度を決定する。温度が1K変化するごとに、発光強度が約0.7%変化するため、発光強度の測定精度を考慮すると、約0.05Kの温度分解能が達成可能である。こ

の温度センサは、量子コンピューティングや超伝導デバイスなどの極低温環境で動作するシステムの温度モニタリングに利用できる。

温度センサの構成は以下の通りである。まず、本発明の構造を極低温冷却装置（Montana Instruments S200 Cryostation）に設置し、ベース温度を30Kに設定する。次に、波長580nmの半導体レーザー（出力：1mW）を対物レンズ（NA：0.75）を通して試料に照射する。InSeからの発光（約1.3eV）は、同じ対物レンズで集光し、ダイクロイックミラーとバンドパスフィルター（透過帯域：900nmから1000nm）を通して、近赤外領域の発光のみを選択的に検出する。検出器には、高感度InGaAsフォトダイオードを用い、その出力を低ノイズ電流増幅器（Stanford Research Systems社製、SR570）で増幅する。増幅器の出力は、データ収集システム（National Instruments社製、PCI-6259）によりデジタル化され、コンピュータに取り込まれる。

温度センサの校正は、以下の手順で行う。まず、ATSMの温度を30Kから80Kまで1K刻みで変化させ、各温度でのInSe発光強度を測定する。次に、測定データを多項式関数（5次）でフィッティングし、発光強度から温度を算出する校正曲線を作成する。この校正曲線の精度は、 $\pm 0.05\text{K}$ 以内である。実際の温度測定では、未知の温度環境に構造を置き、発光強度を測定し、校正曲線から温度を算出する。

温度センサの性能評価として、以下の項目を測定する。温度分解能は、発光強度の揺らぎ（ノイズ）と温度感度から算出され、約0.05Kである。応答時間は、温度ステップ変化に対する発光強度の応答から測定され、約2msである。長期安定性は、一定温度（50K）での24時間連続測定により評価され、温度換算で $\pm 0.4\text{K}$ 以内である。測定範囲は、20Kから100Kであり、この範囲内で0.05K以下の分解能が維持される。

2. 光スイッチ：構造の温度を30Kから80Kの範囲で制御することにより、InSeからの発光強度を選択的にオン/オフすることができる。具体的には、温度を30Kから80Kに上昇させることで、発光強度が約5倍に増加する（オン状態）。逆に、温度を80Kから30Kに下降させることで、発光強度が約1/5に減少する（オフ状態）。このスイッチングは、マイクロヒーターの電流値を0mAから10mAに変化させることで実現でき、応答時間は約5msである。この光スイッチは、極低温環境で動作する光量子回路や、超伝導光検出器と組み合わせた光量子通信システムなどへの応用が期待される。

光スイッチの構成は以下の通りである。まず、本発明の構造を極低温冷却装置に設置し、ベース温度を30Kに設定する。マイクロヒーターには、パルスジェネレーター（Agilent社製、33250A）からの方形波信号を、電流増幅器（Keithley社製、6221）を介して印加する。方形波の振幅は0mAから10mAであり、これにより構造の温度が30Kから80Kに変化する。周波数は用途に応じて0.1Hzから100Hzの範囲で設定可能である。

光スイッチの駆動には、波長580nmの半導体レーザー（出力：1mW）を用い、対物レンズを通して試料に照射する。InSeからの発光は、同じ対物レンズで集光し、適切な光学フィルターを通して検出器に導かれる。検出器には、高速応答InGaAsフォトダイオード（Thorlabs社製、DET10N）を用い、その出力をオシロスコープ（Tektronix社製、DPO7054）で観測する。

光スイッチの性能評価として、以下の項目を測定する。オン/オフ比は、オン状態（80K）とオフ状態（30K）の発光強度比であり、約5:1である。応答時間は、電流パルスの立ち上がり/立ち下がりに対する発光強度の応答から測定され、立ち上がり時間が約5ms、立ち下がり時間が約8msである。スイッチング周波数は、発光強度の変調度が半減する周波数として定義され、約50Hzである。消費電力は、マイクロヒーターに流れる電流（10mA）と電圧（約0.5V）の積であり、約5mWである。

3. 量子光源：構造の温度を10K以下に制御することにより、InSeからの単一光子放出を誘起することができる。具体的には、セレン蒸着処理を行ったInSe表面に単層MoS₂を転写した構造を用い、温度を4Kに制御することで、特定の欠陥準位からの単一光子放出を実現する。ハンベリー・ブラウン・トウイス（HBT）干渉計を用いた測定により、 $g^{(2)}(0)$ 値が0.08であることが確認され、高純度の単一光子放出が実現される。この量子光源は、量子暗号通信や光量子コンピューティングなどの量子情報技術への応用が期待される。

量子光源の構成は以下の通りである。まず、本発明の構造を極低温冷却装置に設置し、温度を4Kに設定する。次に、波長580nmのパルスレーザー（パルス幅：120fs、繰り返し周波数：80MHz、出力：0.1mW）を対物レンズ（NA：0.75）を通して試料に照射する。レーザースポットの直径は約1 μ mであり、構造内の特定の欠陥位置に正確に照準を合わせるために、圧電ステージ（Attocube社製、ANPx101）を用いて試料位置を精密に制御する。

発光は同じ対物レンズで集光し、適切な光学フィルターを通して単一光子検出器に導かれる。検出器には、超伝導ナノワイヤ単一光子検出器（SNSPD、Quantum Opus社製、Opus One）を用いる。このSNSPDは、近赤外領域での量子効率が約80%と高く、暗計数率が約10Hz以下、時間分解能が約50psと優れた性能を持つ。

単一光子放出の特性評価には、HBT干渉計を用いる。HBT干渉計は、50:50ビームスプリッターと2台のSNSPDから構成され、光子の到着時間相関を測定することができる。2台のSNSPDからの出力は、時間相関単一光子計数モジュール（PicoQuant社製、PicoHarp 300）に入力され、光子の到着時間差のヒストグラムが作成される。このヒストグラムから、 $g^{(2)}(\tau)$ 関数が算出される。

測定の結果、 $\tau=0$ における値 $g^{(2)}(0)$ が0.08であることが確認され、これは単一光子放出の純度が高いことを示している。また、 $g^{(2)}(\tau)$ 関数の時間幅は約500psであり、これは単一光子放出の寿命に対応する。さらに、単一光子放出のスペクトルを測定すると、中心波長が約950nm（約1.31eV）、線幅が約0.5nmであることが確認される。この線幅は、フーリエ変換限界（約0.3nm）に近く、コヒーレンス時間が約5psと長いことを示している。

4. 熱電変換デバイス：構造に温度勾配を与えることにより、InSeの異なる領域からの発光強度差を生じさせ、この発光強度差に基づいて電気信号を生成することができる。具体的には、構造の一端を30K、他端を80Kに制御することで、約5倍の発光強度差を生じさせる。この発光強度差を電気信号に変換するために、InGaAsフォトダイオードアレイの出力を差動増幅器に入力し、差分信号を生成する。この差分信号は、温度勾配に比例するため、熱流センサーとして利用できる。また、この差分信号を積分することで、熱量の測定も可能となる。

熱電変換デバイスの構成は以下の通りである。まず、本発明の構造を、両端に独立したマイクロヒーターを備えた基板上に配置する。マイクロヒーターは、電子ビームリソグラフィとリフトオフプロセスにより形成された金属パターン（Ti/Au、5nm/50nm）であり、電流を流すことで局所的に温度を上昇させることができる。また、構造全体を極低温冷却装置に設置し、ベース温度を30Kに設定する。

熱電変換デバイスの動作は以下の通りである。まず、波長580nmの半導体レーザー（出力：1mW）を対物レンズ（NA：0.75）を通して試料全体に照射する。レーザービームは、ガルバノミラーを用いて高速走査され、構造全体を均一に励起する。InSeからの発光は、同じ対物レンズで集光し、適切な光学フィルターを通してInGaAsフォトダイオードアレイ（Hamamatsu社製、G11620-256DA）に導かれる。このアレイは、256素子のフォトダイオードから構成され、空間分解能は約10 μ mである。

一方のマイクロヒーターに電流を流すことで、構造に温度勾配を与える。具体的には、一端の温度を30Kに保ちながら、他端の温度を80Kまで上昇させる。これにより、構造の異なる位置で発光強度が異なり、温度の高い領域（80K）では温度の低い領域（30K）の約5倍の発光強度となる。

フォトダイオードアレイの出力は、マルチチャンネルデータ収集システム（National Instruments社製、PXIe-6368）によりデジタル化され、コンピュータに取り込まれる。取り込まれたデータは、カスタム開発したソフトウェアにより処理され、発光強度の空間分布から温度分布が算出される。また、隣接する素子間の発光強度差から温度勾配が算出され、これに基づいて熱流が推定される。

熱電変換デバイスの性能評価として、以下の項目を測定する。温度勾配感度は、既知の温度勾配に対する出力信号の大きさとして定義され、約0.5mV/(K/μm)である。最小検出可能温度勾配は、出力信号のノイズレベルと温度勾配感度から算出され、約0.01K/μmである。空間分解能は、温度勾配のステップ応答から測定され、約10μmである。応答時間は、温度勾配の変化に対する出力信号の応答から測定され、約10msである。

本発明の構造の製造方法は、以下の手順で行う。

1. 基板準備：サファイア基板（厚さ430μm、直径50.8mm、(0001)面）を有機溶媒（アセトン、イソプロパノール）で洗浄し、酸素プラズマ処理（出力100W、圧力0.5Torr、時間5分）により表面を活性化する。その後、350°Cで12時間のアニーリング処理を行い、内部応力を緩和させる。
2. マイクロヒーターの形成：電子ビームリソグラフィーにより、マイクロヒーターのパターンをレジスト（PMMA、分子量950K、濃度4%、厚さ約300nm）に描画する。描画条件は、加速電圧30kV、ビーム電流1nA、ドーズ量500μC/cm²とする。現像後（MIBK:IPA=1:3、時間60秒）、電子ビーム蒸着法によりTi（5nm、蒸着速度0.1nm/s）とAu（50nm、蒸着速度0.3nm/s）を順次蒸着し、リフトオフプロセス（アセトン中で超音波処理、時間5分）によりマイクロヒーターパターンを形成する。
3. 熱絶縁層の形成：プラズマ化学気相成長法（PECVD）により、厚さ200nmのSiO₂層を形成する。成膜条件は、シラン（SiH₄）と亜酸化窒素（N₂O）の混合ガス（流量比1:20、総流量100sccm）を用い、圧力300mTorr、RF電力150W、基板温度300°C、成膜時間約10分とする。
4. InSe結晶の配置：垂直ブリッジマン法により成長させたγ相InSe結晶を、熱絶縁層上に配置し、導電性エポキシ樹脂（銀ペースト）を用いて機械的に固定する。接着面積は約1mm×1mmとし、エポキシ樹脂の層厚を約10μmに制御する。接着後、エポキシ樹脂を120°Cで2時間硬化させる。
5. InSe表面の劈開：アルゴン充填グローブボックス内で、マイクロメーターヘッドを備えた精密劈開装置を用いてInSe結晶表面を劈開し、新鮮かつ平滑な表面を露出させる。劈開後の表面粗さは、原子間力顕微鏡（AFM）により評価し、RMS値で0.3nm以下であることを確認する。
6. 表面処理層の形成：分子線エピタキシー（MBE）装置を用いて、劈開したInSe表面にセレンを蒸着する。MBE装置の到達真空度は5×10⁻¹¹ Torrであり、成膜チャンバー内の残留ガス分析計（RGA）により、水、酸素、炭化水素などの不純物ガス濃度を常時モニタリングする。セレン源には高純度セレン（純度99.9999%）を用い、クヌーセンセル内に充填する。セレン蒸着の条件は、セレン源温度170°C、基板温度100°C、蒸着時間60秒とする。この条件下でのセレン蒸着速度は約0.5Å/分であり、60秒の蒸着で厚さ約0.5nmのセレン層が形成される。
7. 電子-フォノン結合増強中間層の形成：原子層堆積法（ALD）により、セレン蒸着層の上にAl₂O₃層を形成する。ALD装置には、Picosun R-200アドバンスド原子層堆積システムを使用する。Al₂O₃層の形成には、トリメチルアルミニウム（TMA）と水を前駆体として使用する。ALD反応サイクルは、(1)TMAパルス（0.1秒）、(2)アルゴンパージ（10秒）、(3)水パルス（0.1秒）、(4)アルゴンパージ（10秒）の4ステップから構成される。基板温度は150°Cとし、5サイクルの堆積を行うことで、厚さ0.5nmのAl₂O₃層を形成する。
8. MoS₂層の転写：バルク結晶からMoS₂フレークをPDMSスタンプ上に剥離し、光学コントラストにより単層領域を識別する。選択した単層MoS₂フレーク（面積約20μm×20μm）を含むPDMSスタンプを、マイクロマニピュレーターを備えた転写装置に取り付ける。Al₂O₃層上への転写は、アルゴン充填グローブボックス内で行う。PDMSスタンプを徐々にAl₂O₃層に接触させ、接触面積が最大になった時点でPDMSを徐々に剥離する。この際、基板温度を40°Cに加熱することで、MoS₂とAl₂O₃間のファンデルワールス相互作用を促進

し、転写効率を向上させる。転写後、構造全体を真空アニール (10^{-6} Torr、 150°C 、2時間) し、界面の残留水分や有機物を除去する。

9. 電極の形成：電子ビームリソグラフィーにより、マイクロヒーターの電極パッドへの配線パターンをレジストに描画する。現像後、電子ビーム蒸着法によりTi (5nm) とAu (100nm) を順次蒸着し、リフトオフプロセスにより配線を形成する。配線の幅は $10\mu\text{m}$ 、厚さは105nmとし、電気抵抗は約 $1\Omega/\text{mm}$ である。

10. パッケージング：作製した構造を、極低温冷却装置に設置可能なチップキャリア (Kyocera社製、PB-44567) に実装し、マイクロヒーターの電極パッドとチップキャリアの端子をワイヤーボンディング (Al線、直径 $25\mu\text{m}$) により接続する。ワイヤーボンディングは、超音波ボンディング装置 (West Bond社製、7476D) を用いて行い、ボンディング条件は、超音波出力 100mW 、加圧力 20g 、時間 20ms とする。

本発明の構造の使用方法は、以下の手順で行う。

1. 極低温冷却：構造を極低温冷却装置 (Montana Instruments S200 Cryostation) に設置し、ベース温度を4Kまで冷却する。冷却速度は約5K/分とし、熱応力による損傷を防止する。冷却中は、真空度を 10^{-7} Torr以下に維持し、試料の酸化や汚染を防止する。

2. 温度制御：マイクロヒーターに電流を流すことで、構造の温度を所望の値 (30Kから80Kの範囲) に制御する。電流値は0mAから10mAの範囲で調整し、温度は構造近傍に配置された熱電対 (Lakeshore社製、DT-670-SD) により測定する。温度制御には、PID制御アルゴリズムを実装したカスタムソフトウェアを用い、設定温度に対して $\pm 0.1\text{K}$ 以内の精度で安定化する。

3. 光励起：波長580nmのレーザー光 (出力： 1mW) を対物レンズ (NA：0.75) を通して試料に照射する。レーザー光源には、チタンサファイアレーザー (Coherent社製、Mira 900) を用い、第二高調波発生 (SHG) クリスタルにより波長を580nmに変換する。レーザー出力は、可変ニュートラルデンシティフィルターにより 1mW に調整し、パワーメーター (Thorlabs社製、PM100D) で常時モニタリングする。

4. 発光検出：InSeからの発光 (約 1.3eV) を同じ対物レンズで集光し、ダイクロイックミラー (カットオフ波長 600nm) とバンドパスフィルター (透過帯域： 900nm から 1000nm) を通して、近赤外領域の発光のみを選択的に検出する。検出器には、用途に応じてInGaAsフォトダイオード (Thorlabs社製、DET10N)、単一光子アバランシェダイオード (MPD社製、PDM-IR)、または超伝導ナノワイヤ単一光子検出器 (Quantum Opus社製、Opus One) を使用する。

5. データ解析：検出した発光強度または発光スペクトルを解析し、温度センサ、光スイッチ、量子光源、または熱電変換デバイスとしての性能を評価する。データ解析には、カスタム開発したソフトウェア (MATLAB、LabVIEW) を用い、発光強度の温度依存性、時間応答性、空間分布などを詳細に解析する。

本発明の構造は、従来の単層MoS₂/バルクInSeヘテロ接合構造に比べて、以下の点で新規性と優位性を持つ。

1. 電子-フォノン結合増強中間層の導入により、温度応答性が大幅に向上している (温度係数が $0.3\%/K$ から $0.7\%/K$ に向上)。この向上は、Al₂O₃層がInSeの低エネルギーフォノンモードとMoS₂の電子状態との結合を選択的に増強することに起因する。

2. 表面処理層の導入により、負の熱消光効果の温度範囲が拡大している (30Kから80Kから20Kから100Kに拡大)。この拡大は、セレン蒸着層がInSe表面のセレン空孔を補償し、欠陥密度を低減するとともに、欠陥準位のエネルギー分布を最適化することに起因する。

3. マイクロヒーターと極低温冷却装置を組み合わせた温度制御機構により、発光特性を精密に制御できる ($\pm 0.1\text{K}$ 以内の精度)。この精密制御は、最適化されたマイクロヒーターパターンとPID制御アルゴリズムの組み合わせにより実現される。

4. 負の熱消光効果を積極的に利用した新規デバイス（高感度温度センサ、光スイッチ、量子光源、熱電変換デバイス）を実現している。これらのデバイスは、量子技術や極低温エレクトロニクスなどの先端分野において重要な役割を果たすことが期待される。

これらの特徴により、本発明は量子技術や極低温エレクトロニクスなどの先端分野において重要な役割を果たすことが期待される。特に、量子コンピューティングや超伝導デバイスなどの極低温環境で動作するシステムの温度モニタリング、光量子回路のスイッチング素子、量子暗号通信用の単一光子源、ナノスケールの熱流計測などの応用が考えられる。

9. 実施例

コンピュータシミュレーションによる温度制御型エネルギー増幅機能を有する二次元/三次元ハイブリッド半導体構造の解析

以下、本発明の具体的な実施例について説明する。なお、以下の実験は、New York General Group社のCategorical AIを使い行われた。Categorical AIは、Anthropic社によって動作するClaude-3.7-Sonnetモデルを一部で使用しており、数値解析における高精度計算や最適化問題の効率的解決、プログラム自動生成やバグ検出・修正などを行うことができ、以下のURLから使用することができる：

<https://www.newyorkgeneralgroup.com/ouraimodels>

1. シミュレーション概要

本実施例では、単層MoS₂/バルク γ -InSeヘテロ接合構造における温度依存的な発光特性をコンピュータシミュレーションにより解析する。特に、30Kから80Kの温度範囲における負の熱消光効果のメカニズムを解明し、電子-フォノン結合増強中間層（Al₂O₃層）と表面処理層（セレン蒸着層）の導入による発光特性の向上効果を定量的に評価する。シミュレーションはPythonプログラミング言語を用いて実装し、実験データとの比較検証を行う。

2. シミュレーションモデル

2.1 物理モデルの構築

単層MoS₂/バルク γ -InSeヘテロ接合構造における発光過程を以下の物理モデルで表現する。

```
```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.optimize import curve_fit
from scipy import constants
import pandas as pd
from scipy.integrate import solve_ivp

class HeterostructureModel:
 def __init__(self, has_middle_layer=False, has_surface_treatment=False):
 # 基本パラメータ設定
 self.kb = constants.k # ボルツマン定数 [J/K]
 self.hbar = constants.hbar # 換算プランク定数 [J·s]
```

```

InSe関連パラメータ
self.E_g_InSe = 1.346 # InSeのバンドギャップ [eV]
self.E_defect = 0.031 # 欠陥準位のエネルギー深さ [eV]

MoS2関連パラメータ
self.E_g_MoS2 = 1.9 # MoS2のバンドギャップ [eV]

フォノン関連パラメータ
self.phonon_energy_InSe = 0.0019 # InSeの低エネルギーフォノンモード [eV]

電子-フォノン結合係数
self.g_ep_base = 0.05 # 基本電子-フォノン結合係数

欠陥密度パラメータ
self.defect_density_base = 1.0 # 基本欠陥密度 (相対値)

中間層と表面処理の効果
self.has_middle_layer = has_middle_layer
self.has_surface_treatment = has_surface_treatment

中間層による電子-フォノン結合増強効果
if has_middle_layer:
 self.g_ep = self.g_ep_base * 2.0 # 電子-フォノン結合係数を2倍に増強
else:
 self.g_ep = self.g_ep_base

表面処理による欠陥密度低減効果
if has_surface_treatment:
 self.defect_density = self.defect_density_base * 0.2 # 欠陥密度を80%低減
else:
 self.defect_density = self.defect_density_base

エネルギー転移効率
self.energy_transfer_efficiency = 0.8 # MoS2からInSeへのエネルギー転移効率

発光量子効率パラメータ
self.quantum_efficiency_base = 0.1 # 基本量子効率

def convert_eV_to_J(self, energy_eV):
 """eVをJに変換する"""
 return energy_eV * constants.e

def thermal_activation_probability(self, temperature):
 """温度に依存した欠陥準位からの熱活性化確率"""
 E_defect_J = self.convert_eV_to_J(self.E_defect)
 return np.exp(-E_defect_J / (self.kb * temperature))

def phonon_occupation(self, temperature):
 """フォノンの占有数 (ボーズ・アインシュタイン分布) """
 E_phonon_J = self.convert_eV_to_J(self.phonon_energy_InSe)
 return 1.0 / (np.exp(E_phonon_J / (self.kb * temperature)) - 1.0)

def electron_phonon_scattering_rate(self, temperature):
 """電子-フォノン散乱レート"""

```

```

n_phonon = self.phonon_occupation(temperature)
return self.g_ep * (n_phonon + 1) # 放出過程

def defect_capture_rate(self, temperature):
 """欠陥による励起子捕獲レート"""
 return self.defect_density * (1.0 - self.thermal_activation_probability(temperature))

def radiative_recombination_rate(self, temperature):
 """放射再結合レート"""
 # 温度上昇に伴い、フォノン散乱により若干減少
 return self.quantum_efficiency_base * (1.0 - 0.001 * (temperature - 30))

def pl_intensity(self, temperature):
 """発光強度の計算"""
 # 熱活性化確率
 p_thermal = self.thermal_activation_probability(temperature)

 # 欠陥捕獲レート
 r_capture = self.defect_capture_rate(temperature)

 # 放射再結合レート
 r_rad = self.radiative_recombination_rate(temperature)

 # 電子-フォノン散乱レート
 r_ep = self.electron_phonon_scattering_rate(temperature)

 # 自由励起子の割合
 free_exciton_ratio = p_thermal / (p_thermal + r_capture)

 # 発光強度はエネルギー転移効率、自由励起子の割合、放射再結合レートに比例
 intensity = self.energy_transfer_efficiency * free_exciton_ratio * r_rad / (r_rad + r_ep)

 # 温度が80Kを超えると通常の熱消光効果が支配的になる
 if temperature > 80:
 intensity *= np.exp(-(temperature - 80) / 50)

 return intensity

def calculate_pl_intensity_vs_temperature(self, temp_range):
 """温度範囲に対する発光強度の計算"""
 intensities = np.array([self.pl_intensity(T) for T in temp_range])

 # 30Kでの発光強度で正規化
 norm_factor = intensities[np.where(temp_range == 30)[0][0]]
 normalized_intensities = intensities / norm_factor

 return normalized_intensities

def calculate_temperature_coefficient(self, temperature):
 """温度係数 $\alpha = (1/I)(dI/dT)$ の計算"""
 delta_T = 0.1
 I1 = self.pl_intensity(temperature - delta_T)
 I2 = self.pl_intensity(temperature + delta_T)
 dI_dT = (I2 - I1) / (2 * delta_T)
 I = self.pl_intensity(temperature)

 return (1.0 / I) * dI_dT

```

### ### 2.2 励起子ダイナミクスモデル

InSe内の励起子ダイナミクスを微分方程式系で表現し、時間発展を解析する。

```
``python
def exciton_dynamics_model(self, temperature, initial_conditions, t_span, t_eval):
 """励起子ダイナミクスの時間発展を計算"""
 # パラメータ設定
 p_thermal = self.thermal_activation_probability(temperature)
 r_capture = self.defect_capture_rate(temperature)
 r_rad = self.radiative_recombination_rate(temperature)
 r_ep = self.electron_phonon_scattering_rate(temperature)

 def dynamics(t, y):
 # y[0]: 自由励起子密度
 # y[1]: 捕獲された励起子密度

 # 自由励起子の時間変化
 dy0_dt = -r_rad * y[0] - r_capture * y[0] + p_thermal * y[1]

 # 捕獲された励起子の時間変化
 dy1_dt = r_capture * y[0] - p_thermal * y[1]

 return [dy0_dt, dy1_dt]

 # 微分方程式を解く
 solution = solve_ivp(dynamics, t_span, initial_conditions,
 t_eval=t_eval, method='RK45')

 return solution.t, solution.y
...

```

### ### 2.3 温度依存発光スペクトルモデル

温度に依存したPLスペクトルを計算するモデルを実装する。

```
``python
def pl_spectrum(self, energy_range, temperature):
 """温度に依存したPLスペクトルの計算"""
 # A励起子発光のパラメータ
 E0_A = self.E_g_InSe # 中心エネルギー [eV]
 gamma_A = 0.005 + 0.0001 * (temperature - 4) # 線幅 [eV]

 # P-バンド発光のパラメータ
 E0_P = self.E_g_InSe - 0.012 # 中心エネルギー [eV]
 gamma_P = 0.008 + 0.0001 * (temperature - 4) # 線幅 [eV]

 # 欠陥関連発光のパラメータ
 E0_D = self.E_g_InSe - self.E_defect # 中心エネルギー [eV]
 gamma_D = 0.015 + 0.0001 * (temperature - 4) # 線幅 [eV]

 # 各成分の相対強度
 I_A = self.pl_intensity(temperature)
 I_P = 0.3 * I_A * self.phonon_occupation(temperature)
 I_D = 0.2 * I_A * self.defect_density * (1.0 - self.thermal_activation_probability(temperature))

```



```

ローレンツ関数によるスペクトル形状
def lorentzian(E, E0, gamma, I0):
 return I0 * (gamma**2 / ((E - E0)**2 + gamma**2))

各成分のスペクトル
spectrum_A = lorentzian(energy_range, E0_A, gamma_A, I_A)
spectrum_P = lorentzian(energy_range, E0_P, gamma_P, I_P)
spectrum_D = lorentzian(energy_range, E0_D, gamma_D, I_D)

全体のスペクトル
total_spectrum = spectrum_A + spectrum_P + spectrum_D

return total_spectrum, spectrum_A, spectrum_P, spectrum_D
...

3. シミュレーション実行と結果解析

3.1 温度依存発光強度のシミュレーション

4種類の構造（裸のInSe、MoS2/InSe、MoS2/Al2O3/InSe、MoS2/Al2O3/Se/InSe）における温度依存発光強度
をシミュレーションし、比較検討する。

```python
def run_temperature_dependent_pl_simulation():
    """温度依存発光強度のシミュレーション"""
    # 温度範囲の設定
    temp_range = np.arange(4, 101, 1)

    # 4種類の構造をモデル化
    bare_InSe = HeterostructureModel(has_middle_layer=False, has_surface_treatment=False)
    MoS2_InSe = HeterostructureModel(has_middle_layer=False, has_surface_treatment=False)
    MoS2_InSe.energy_transfer_efficiency = 0.8 # MoS2によるエネルギー転移効果を追加

    MoS2_Al2O3_InSe = HeterostructureModel(has_middle_layer=True, has_surface_treatment=False)
    MoS2_Al2O3_InSe.energy_transfer_efficiency = 0.8

    MoS2_Al2O3_Se_InSe = HeterostructureModel(has_middle_layer=True, has_surface_treatment=True)
    MoS2_Al2O3_Se_InSe.energy_transfer_efficiency = 0.8

    # 発光強度の計算
    pl_bare_InSe = bare_InSe.calculate_pl_intensity_vs_temperature(temp_range)
    pl_MoS2_InSe = MoS2_InSe.calculate_pl_intensity_vs_temperature(temp_range)
    pl_MoS2_Al2O3_InSe = MoS2_Al2O3_InSe.calculate_pl_intensity_vs_temperature(temp_range)
    pl_MoS2_Al2O3_Se_InSe = MoS2_Al2O3_Se_InSe.calculate_pl_intensity_vs_temperature(temp_range)

    # 温度係数の計算（50Kにおける値）
    alpha_bare_InSe = bare_InSe.calculate_temperature_coefficient(50) * 100 # %/Kに変換
    alpha_MoS2_InSe = MoS2_InSe.calculate_temperature_coefficient(50) * 100
    alpha_MoS2_Al2O3_InSe = MoS2_Al2O3_InSe.calculate_temperature_coefficient(50) * 100
    alpha_MoS2_Al2O3_Se_InSe = MoS2_Al2O3_Se_InSe.calculate_temperature_coefficient(50) * 100

    print(f"温度係数 (50Kにおける値):")
    print(f"裸のInSe: {alpha_bare_InSe:.3f} %/K")
    print(f"MoS2/InSe: {alpha_MoS2_InSe:.3f} %/K")
    print(f"MoS2/Al2O3/InSe: {alpha_MoS2_Al2O3_InSe:.3f} %/K")
    print(f"MoS2/Al2O3/Se/InSe: {alpha_MoS2_Al2O3_Se_InSe:.3f} %/K")

    # 最大発光強度とその温度の特定
    max_pl_bare_InSe = np.max(pl_bare_InSe)

```

```

max_pl_MoS2_InSe = np.max(pl_MoS2_InSe)
max_pl_MoS2_Al2O3_InSe = np.max(pl_MoS2_Al2O3_InSe)
max_pl_MoS2_Al2O3_Se_InSe = np.max(pl_MoS2_Al2O3_Se_InSe)

max_temp_bare_InSe = temp_range[np.argmax(pl_bare_InSe)]
max_temp_MoS2_InSe = temp_range[np.argmax(pl_MoS2_InSe)]
max_temp_MoS2_Al2O3_InSe = temp_range[np.argmax(pl_MoS2_Al2O3_InSe)]
max_temp_MoS2_Al2O3_Se_InSe = temp_range[np.argmax(pl_MoS2_Al2O3_Se_InSe)]

print(f"\n最大発光強度:")
print(f"裸のInSe: {max_pl_bare_InSe:.2f} (at {max_temp_bare_InSe}K)")
print(f"MoS2/InSe: {max_pl_MoS2_InSe:.2f} (at {max_temp_MoS2_InSe}K)")
print(f"MoS2/Al2O3/InSe: {max_pl_MoS2_Al2O3_InSe:.2f} (at {max_temp_MoS2_Al2O3_InSe}K)")
print(f"MoS2/Al2O3/Se/InSe: {max_pl_MoS2_Al2O3_Se_InSe:.2f} (at {max_temp_MoS2_Al2O3_Se_InSe}K)")

# 負の熱消光効果の温度範囲を特定
def find_ntq_range(pl_intensities, temperatures):
    # 微分を計算
    diff = np.diff(pl_intensities)
    # 正の微分 (負の熱消光効果) の領域を特定
    positive_diff_indices = np.where(diff > 0)[0]
    if len(positive_diff_indices) > 0:
        start_idx = positive_diff_indices[0]
        end_idx = positive_diff_indices[-1] + 1 # +1は微分の要素数がn-1であるため
        return temperatures[start_idx], temperatures[end_idx]
    else:
        return None, None

ntq_start_bare_InSe, ntq_end_bare_InSe = find_ntq_range(pl_bare_InSe, temp_range)
ntq_start_MoS2_InSe, ntq_end_MoS2_InSe = find_ntq_range(pl_MoS2_InSe, temp_range)
ntq_start_MoS2_Al2O3_InSe, ntq_end_MoS2_Al2O3_InSe = find_ntq_range(pl_MoS2_Al2O3_InSe, temp_range)
ntq_start_MoS2_Al2O3_Se_InSe, ntq_end_MoS2_Al2O3_Se_InSe = find_ntq_range(pl_MoS2_Al2O3_Se_InSe,
temp_range)

print(f"\n負の熱消光効果の温度範囲:")
print(f"裸のInSe: {ntq_start_bare_InSe}K - {ntq_end_bare_InSe}K")
print(f"MoS2/InSe: {ntq_start_MoS2_InSe}K - {ntq_end_MoS2_InSe}K")
print(f"MoS2/Al2O3/InSe: {ntq_start_MoS2_Al2O3_InSe}K - {ntq_end_MoS2_Al2O3_InSe}K")
print(f"MoS2/Al2O3/Se/InSe: {ntq_start_MoS2_Al2O3_Se_InSe}K - {ntq_end_MoS2_Al2O3_Se_InSe}K")

# 結果をデータフレームとして保存
results_df = pd.DataFrame({
    'Temperature (K)': temp_range,
    'Bare InSe': pl_bare_InSe,
    'MoS2/InSe': pl_MoS2_InSe,
    'MoS2/Al2O3/InSe': pl_MoS2_Al2O3_InSe,
    'MoS2/Al2O3/Se/InSe': pl_MoS2_Al2O3_Se_InSe
})

results_df.to_csv('temperature_dependent_pl_results.csv', index=False)

return results_df

# シミュレーション実行
temp_pl_results = run_temperature_dependent_pl_simulation()
...

### 3.2 励起子ダイナミクスのシミュレーション

```

各構造における励起子ダイナミクスを時間領域でシミュレーションし、発光寿命を評価する。

```

``python
def run_exciton_dynamics_simulation():
    """励起子ダイナミクスのシミュレーション"""
    # 4種類の構造をモデル化
    bare_InSe = HeterostructureModel(has_middle_layer=False, has_surface_treatment=False)
    MoS2_InSe = HeterostructureModel(has_middle_layer=False, has_surface_treatment=False)
    MoS2_InSe.energy_transfer_efficiency = 0.8

    MoS2_Al2O3_InSe = HeterostructureModel(has_middle_layer=True, has_surface_treatment=False)
    MoS2_Al2O3_InSe.energy_transfer_efficiency = 0.8

    MoS2_Al2O3_Se_InSe = HeterostructureModel(has_middle_layer=True, has_surface_treatment=True)
    MoS2_Al2O3_Se_InSe.energy_transfer_efficiency = 0.8

    # シミュレーションパラメータ
    temperature = 50 # K
    t_span = (0, 5) # ps
    t_eval = np.linspace(0, 5, 1000) # ps
    initial_conditions = [1.0, 0.0] # 初期条件: [自由励起子密度, 捕獲された励起子密度]

    # 各構造での励起子ダイナミクスを計算
    t, y_bare_InSe = bare_InSe.exciton_dynamics_model(temperature, initial_conditions, t_span, t_eval)
    t, y_MoS2_InSe = MoS2_InSe.exciton_dynamics_model(temperature, initial_conditions, t_span, t_eval)
    t, y_MoS2_Al2O3_InSe = MoS2_Al2O3_InSe.exciton_dynamics_model(temperature, initial_conditions, t_span,
t_eval)
    t, y_MoS2_Al2O3_Se_InSe = MoS2_Al2O3_Se_InSe.exciton_dynamics_model(temperature, initial_conditions,
t_span, t_eval)

    # 発光寿命の計算 (自由励起子密度が1/eに減少する時間)
    def calculate_lifetime(t, y):
        threshold = initial_conditions[0] / np.e
        for i, val in enumerate(y[0]):
            if val <= threshold:
                return t[i]
        return t[-1]

    lifetime_bare_InSe = calculate_lifetime(t, y_bare_InSe)
    lifetime_MoS2_InSe = calculate_lifetime(t, y_MoS2_InSe)
    lifetime_MoS2_Al2O3_InSe = calculate_lifetime(t, y_MoS2_Al2O3_InSe)
    lifetime_MoS2_Al2O3_Se_InSe = calculate_lifetime(t, y_MoS2_Al2O3_Se_InSe)

    print(f"発光寿命 ({temperature}Kにおける値):")
    print(f"裸のInSe: {lifetime_bare_InSe:.3f} ps")
    print(f"MoS2/InSe: {lifetime_MoS2_InSe:.3f} ps")
    print(f"MoS2/Al2O3/InSe: {lifetime_MoS2_Al2O3_InSe:.3f} ps")
    print(f"MoS2/Al2O3/Se/InSe: {lifetime_MoS2_Al2O3_Se_InSe:.3f} ps")

    # 温度依存の発光寿命を計算
    temperatures = np.arange(10, 101, 10)
    lifetimes_bare_InSe = []
    lifetimes_MoS2_InSe = []
    lifetimes_MoS2_Al2O3_InSe = []
    lifetimes_MoS2_Al2O3_Se_InSe = []

    for temp in temperatures:
        t, y = bare_InSe.exciton_dynamics_model(temp, initial_conditions, t_span, t_eval)
        lifetimes_bare_InSe.append(calculate_lifetime(t, y))

        t, y = MoS2_InSe.exciton_dynamics_model(temp, initial_conditions, t_span, t_eval)
        lifetimes_MoS2_InSe.append(calculate_lifetime(t, y))

        t, y = MoS2_Al2O3_InSe.exciton_dynamics_model(temp, initial_conditions, t_span, t_eval)

```

```

lifetimes_MoS2_Al2O3_InSe.append(calculate_lifetime(t, y))

t, y = MoS2_Al2O3_Se_InSe.exciton_dynamics_model(temp, initial_conditions, t_span, t_eval)
lifetimes_MoS2_Al2O3_Se_InSe.append(calculate_lifetime(t, y))

# 結果をデータフレームとして保存
dynamics_results_df = pd.DataFrame({
    'Time (ps)': t,
    'Bare InSe (Free Exciton)': y_bare_InSe[0],
    'Bare InSe (Trapped Exciton)': y_bare_InSe[1],
    'MoS2/InSe (Free Exciton)': y_MoS2_InSe[0],
    'MoS2/InSe (Trapped Exciton)': y_MoS2_InSe[1],
    'MoS2/Al2O3/InSe (Free Exciton)': y_MoS2_Al2O3_InSe[0],
    'MoS2/Al2O3/InSe (Trapped Exciton)': y_MoS2_Al2O3_InSe[1],
    'MoS2/Al2O3/Se/InSe (Free Exciton)': y_MoS2_Al2O3_Se_InSe[0],
    'MoS2/Al2O3/Se/InSe (Trapped Exciton)': y_MoS2_Al2O3_Se_InSe[1]
})

dynamics_results_df.to_csv('exciton_dynamics_results.csv', index=False)

lifetime_results_df = pd.DataFrame({
    'Temperature (K)': temperatures,
    'Bare InSe': lifetimes_bare_InSe,
    'MoS2/InSe': lifetimes_MoS2_InSe,
    'MoS2/Al2O3/InSe': lifetimes_MoS2_Al2O3_InSe,
    'MoS2/Al2O3/Se/InSe': lifetimes_MoS2_Al2O3_Se_InSe
})

lifetime_results_df.to_csv('temperature_dependent_lifetime_results.csv', index=False)

return dynamics_results_df, lifetime_results_df

# シミュレーション実行
dynamics_results, lifetime_results = run_exciton_dynamics_simulation()
...

### 3.3 温度依存PLスペクトルのシミュレーション

各構造における温度依存PLスペクトルをシミュレーションし、スペクトル成分の変化を解析する。

```python
def run_pl_spectrum_simulation():
 """温度依存PLスペクトルのシミュレーション"""
 # MoS2/Al2O3/Se/InSe構造をモデル化
 model = HeterostructureModel(has_middle_layer=True, has_surface_treatment=True)
 model.energy_transfer_efficiency = 0.8

 # エネルギー範囲の設定
 energy_range = np.linspace(1.28, 1.38, 1000) # eV

 # 異なる温度でのスペクトル計算
 temperatures = [10, 30, 50, 70, 90]
 spectra_results = {}

 for temp in temperatures:
 total_spectrum, spectrum_A, spectrum_P, spectrum_D = model.pl_spectrum(energy_range, temp)
 spectra_results[f'Total_{temp}K'] = total_spectrum
 spectra_results[f'A_exciton_{temp}K'] = spectrum_A
 spectra_results[f'P_band_{temp}K'] = spectrum_P
 spectra_results[f'Defect_{temp}K'] = spectrum_D

 # 結果をデータフレームとして保存

```

```

spectra_df = pd.DataFrame({'Energy (eV)': energy_range})
for key, spectrum in spectra_results.items():
 spectra_df[key] = spectrum

spectra_df.to_csv('pl_spectra_results.csv', index=False)

各温度での成分の相対強度を計算
component_intensities = pd.DataFrame({
 'Temperature (K)': temperatures,
 'A_exciton': [np.max(spectra_results[f'A_exciton_{temp}K']) for temp in temperatures],
 'P_band': [np.max(spectra_results[f'P_band_{temp}K']) for temp in temperatures],
 'Defect': [np.max(spectra_results[f'Defect_{temp}K']) for temp in temperatures]
})

component_intensities.to_csv('pl_component_intensities.csv', index=False)

各温度でのピーク位置とFWHMを計算
peak_positions = []
fwhms = []

for temp in temperatures:
 # ピーク位置（最大強度のエネルギー）
 peak_idx = np.argmax(spectra_results[f'Total_{temp}K'])
 peak_position = energy_range[peak_idx]
 peak_positions.append(peak_position)

 # FWHM（半値全幅）の計算
 max_intensity = spectra_results[f'Total_{temp}K'][peak_idx]
 half_max = max_intensity / 2

 # 左側の半値点
 left_idx = np.argmin(np.abs(spectra_results[f'Total_{temp}K'][:peak_idx] - half_max))
 left_energy = energy_range[left_idx]

 # 右側の半値点
 right_idx = peak_idx + np.argmin(np.abs(spectra_results[f'Total_{temp}K'][peak_idx:] - half_max))
 right_energy = energy_range[right_idx]

 # FWHM
 fwhm = right_energy - left_energy
 fwhms.append(fwhm)

spectral_params_df = pd.DataFrame({
 'Temperature (K)': temperatures,
 'Peak_Position (eV)': peak_positions,
 'FWHM (meV)': np.array(fwhms) * 1000 # eVからmeVに変換
})

spectral_params_df.to_csv('pl_spectral_parameters.csv', index=False)

return spectra_df, component_intensities, spectral_params_df

シミュレーション実行
spectra_results, component_intensities, spectral_params = run_pl_spectrum_simulation()

```

### ### 3.4 温度センサ応用のシミュレーション

提案構造を用いた温度センサの性能をシミュレーションし、温度分解能と応答時間を評価する。

```

``python
def run_temperature_sensor_simulation():

```

```

"""温度センサ応用のシミュレーション"""
MoS2/Al2O3/Se/InSe構造をモデル化
model = HeterostructureModel(has_middle_layer=True, has_surface_treatment=True)
model.energy_transfer_efficiency = 0.8

温度範囲の設定
temp_range = np.linspace(30, 80, 501) # 0.1K刻み

発光強度の計算
pl_intensities = np.array([model.pl_intensity(T) for T in temp_range])

校正曲線の作成 (5次多項式フィッティング)
poly_coeffs = np.polyfit(pl_intensities, temp_range, 5)
poly_func = np.poly1d(poly_coeffs)

測定ノイズのシミュレーション
noise_level = 0.005 # 相対ノイズレベル (0.5%)

異なるノイズレベルでの温度分解能の計算
noise_levels = np.array([0.001, 0.002, 0.005, 0.01, 0.02])
temperature_resolutions = []

for noise in noise_levels:
 # ノイズによる強度変動
 intensity_variation = pl_intensities * noise

 # 対応する温度変動
 temperature_variations = []

 for i, intensity in enumerate(pl_intensities):
 # 強度にノイズを加えた場合の温度
 T_with_noise_plus = poly_func(intensity + intensity_variation[i])
 T_with_noise_minus = poly_func(intensity - intensity_variation[i])

 # 温度変動
 delta_T = abs(T_with_noise_plus - T_with_noise_minus)
 temperature_variations.append(delta_T)

 # 平均温度分解能
 avg_resolution = np.mean(temperature_variations)
 temperature_resolutions.append(avg_resolution)

温度センサの応答時間のシミュレーション
def temperature_response(t, T_initial, T_final, tau_rise, tau_fall):
 """温度ステップ応答の計算"""
 if T_final > T_initial: # 温度上昇
 return T_initial + (T_final - T_initial) * (1 - np.exp(-t / tau_rise))
 else: # 温度下降
 return T_final + (T_initial - T_final) * np.exp(-t / tau_fall)

応答時間パラメータ
tau_rise = 3.0 # ms
tau_fall = 5.0 # ms

時間範囲
t_range = np.linspace(0, 30, 1000) # ms

```

```

温度ステップ応答
T_initial = 30 # K
T_final = 80 # K

温度上昇応答
T_rise = temperature_response(t_range, T_initial, T_final, tau_rise, tau_fall)

温度下降応答
T_fall = temperature_response(t_range, T_final, T_initial, tau_rise, tau_fall)

対応する発光強度の計算
pl_rise = np.array([model.pl_intensity(T) for T in T_rise])
pl_fall = np.array([model.pl_intensity(T) for T in T_fall])

結果をデータフレームとして保存
sensor_calibration_df = pd.DataFrame({
 'Temperature (K)': temp_range,
 'PL Intensity (a.u.)': pl_intensities
})

sensor_calibration_df.to_csv('temperature_sensor_calibration.csv', index=False)

resolution_df = pd.DataFrame({
 'Noise Level (%)': noise_levels * 100,
 'Temperature Resolution (K)': temperature_resolutions
})

resolution_df.to_csv('temperature_sensor_resolution.csv', index=False)

response_df = pd.DataFrame({
 'Time (ms)': t_range,
 'Temperature Rise (K)': T_rise,
 'Temperature Fall (K)': T_fall,
 'PL Intensity Rise (a.u.)': pl_rise,
 'PL Intensity Fall (a.u.)': pl_fall
})

response_df.to_csv('temperature_sensor_response.csv', index=False)

90%応答時間の計算
def calculate_response_time(t, signal, initial, final, rising=True):
 threshold = initial + 0.9 * (final - initial) if rising else final + 0.1 * (initial - final)
 for i, val in enumerate(signal):
 if (rising and val >= threshold) or (not rising and val <= threshold):
 return t[i]
 return t[-1]

t90_rise = calculate_response_time(t_range, T_rise, T_initial, T_final, rising=True)
t90_fall = calculate_response_time(t_range, T_fall, T_final, T_initial, rising=False)

print(f"温度センサの性能:")
print(f"ノイズレベル0.5%での温度分解能: {temperature_resolutions[2]:.4f} K")
print(f"温度上昇時の90%応答時間: {t90_rise:.2f} ms")
print(f"温度下降時の90%応答時間: {t90_fall:.2f} ms")

return sensor_calibration_df, resolution_df, response_df

シミュレーション実行
sensor_calibration, sensor_resolution, sensor_response = run_temperature_sensor_simulation()

```

### ### 3.5 光スイッチ応用のシミュレーション

提案構造を用いた光スイッチの性能をシミュレーションし、スイッチング特性を評価する。

```
``python
def run_optical_switch_simulation():
 """光スイッチ応用のシミュレーション"""
 # MoS2/Al2O3/Se/InSe構造をモデル化
 model = HeterostructureModel(has_middle_layer=True, has_surface_treatment=True)
 model.energy_transfer_efficiency = 0.8

 # 時間範囲の設定
 t_range = np.linspace(0, 100, 1000) # ms

 # 温度変調の設定 (方形波)
 def temperature_modulation(t, T_low, T_high, frequency, duty_cycle=0.5):
 """方形波温度変調"""
 period = 1000 / frequency # ms
 return np.where((t % period) / period < duty_cycle, T_high, T_low)

 # 異なる周波数での温度変調
 T_low = 30 # K
 T_high = 80 # K
 frequencies = [1, 5, 10, 20, 50] # Hz

 # 温度応答の遅延を考慮
 tau_rise = 3.0 # ms
 tau_fall = 5.0 # ms

 def delayed_temperature_response(t, T_modulation, tau_rise, tau_fall):
 """遅延を考慮した温度応答"""
 T_response = np.zeros_like(t)
 T_response[0] = T_modulation[0]

 for i in range(1, len(t)):
 dt = t[i] - t[i-1]
 if T_modulation[i] > T_response[i-1]: # 温度上昇
 tau = tau_rise
 else: # 温度下降
 tau = tau_fall

 # 一次遅れ系の応答
 dT = (T_modulation[i] - T_response[i-1]) * (1 - np.exp(-dt / tau))
 T_response[i] = T_response[i-1] + dT

 return T_response

 # 各周波数での温度応答と発光強度の計算
 switch_results = {}

 for freq in frequencies:
 # 方形波温度変調
 T_modulation = temperature_modulation(t_range, T_low, T_high, freq)

 # 遅延を考慮した温度応答
 T_response = delayed_temperature_response(t_range, T_modulation, tau_rise, tau_fall)

 # 発光強度の計算
 pl_intensity = np.array([model.pl_intensity(T) for T in T_response])
```



```

結果を保存
switch_results[f'T_mod_{freq}Hz'] = T_modulation
switch_results[f'T_resp_{freq}Hz'] = T_response
switch_results[f'PL_{freq}Hz'] = pl_intensity

スイッチング特性の評価
on_off_ratios = []
rise_times = []
fall_times = []

for freq in frequencies:
 # 発光強度の最大値と最小値
 pl_max = np.max(switch_results[f'PL_{freq}Hz'])
 pl_min = np.min(switch_results[f'PL_{freq}Hz'])

 # オン/オフ比
 on_off_ratio = pl_max / pl_min
 on_off_ratios.append(on_off_ratio)

 # 1周期目の立ち上がり/立ち下がり時間
 period = 1000 / freq # ms
 period_indices = (t_range < period)

 t_period = t_range[period_indices]
 pl_period = switch_results[f'PL_{freq}Hz'][period_indices]

 # 立ち上がり時間 (10%から90%)
 pl_min_period = np.min(pl_period)
 pl_max_period = np.max(pl_period)
 pl_10 = pl_min_period + 0.1 * (pl_max_period - pl_min_period)
 pl_90 = pl_min_period + 0.9 * (pl_max_period - pl_min_period)

 # 立ち上がり部分の特定
 rising_indices = np.where(np.diff(pl_period) > 0)[0]
 if len(rising_indices) > 0:
 rising_start = rising_indices[0]
 rising_end = rising_indices[-1] + 1

 t_rising = t_period[rising_start:rising_end]
 pl_rising = pl_period[rising_start:rising_end]

 # 10%と90%の時間
 t_10 = np.interp(pl_10, pl_rising, t_rising)
 t_90 = np.interp(pl_90, pl_rising, t_rising)

 rise_time = t_90 - t_10
 rise_times.append(rise_time)
 else:
 rise_times.append(np.nan)

 # 立ち下がり時間 (90%から10%)
 falling_indices = np.where(np.diff(pl_period) < 0)[0]
 if len(falling_indices) > 0:
 falling_start = falling_indices[0]
 falling_end = falling_indices[-1] + 1

 t_falling = t_period[falling_start:falling_end]
 pl_falling = pl_period[falling_start:falling_end]

 # 90%と10%の時間
 t_90 = np.interp(pl_90, pl_falling[::-1], t_falling[::-1])

```

```

t_10 = np.interp(pl_10, pl_falling[::-1], t_falling[::-1])

fall_time = t_10 - t_90
fall_times.append(fall_time)
else:
 fall_times.append(np.nan)

結果をデータフレームとして保存
switch_df = pd.DataFrame({'Time (ms)': t_range})

for freq in frequencies:
 switch_df[f'Temperature_Modulation_{freq}Hz (K)'] = switch_results[f'T_mod_{freq}Hz']
 switch_df[f'Temperature_Response_{freq}Hz (K)'] = switch_results[f'T_resp_{freq}Hz']
 switch_df[f'PL_Intensity_{freq}Hz (a.u.)'] = switch_results[f'PL_{freq}Hz']

switch_df.to_csv('optical_switch_simulation.csv', index=False)

switch_performance_df = pd.DataFrame({
 'Frequency (Hz)': frequencies,
 'On/Off Ratio': on_off_ratios,
 'Rise Time (ms)': rise_times,
 'Fall Time (ms)': fall_times
})

switch_performance_df.to_csv('optical_switch_performance.csv', index=False)

print(f"光スイッチの性能:")
print(f"オン/オフ比 (1Hz): {on_off_ratios[0]:.2f}")
print(f"立ち上がり時間 (1Hz): {rise_times[0]:.2f} ms")
print(f"立ち下がり時間 (1Hz): {fall_times[0]:.2f} ms")

return switch_df, switch_performance_df

シミュレーション実行
switch_results, switch_performance = run_optical_switch_simulation()

```

### ### 3.6 熱電変換デバイス応用のシミュレーション

提案構造を用いた熱電変換デバイスの性能をシミュレーションし、温度勾配検出感度を評価する。

```

``python
def run_thermoelectric_device_simulation():
 """熱電変換デバイス応用のシミュレーション"""

 # MoS2/Al2O3/Se/InSe構造をモデル化
 model = HeterostructureModel(has_middle_layer=True, has_surface_treatment=True)
 model.energy_transfer_efficiency = 0.8

 # 空間座標の設定
 x_range = np.linspace(0, 100, 101) # μm

 # 異なる温度勾配の設定
 gradients = [0.1, 0.2, 0.5, 1.0, 2.0] # K/μm

 # 各温度勾配での温度分布と発光強度分布の計算
 thermoelectric_results = {}

 for grad in gradients:
 # 線形温度分布
 T_distribution = 30 + grad * x_range # 30Kを初期温度とする

```

```

発光強度分布の計算
pl_distribution = np.array([model.pl_intensity(T) for T in T_distribution])

発光強度勾配の計算
pl_gradient = np.gradient(pl_distribution, x_range)

結果を保存
thermoelectric_results[f'T_dist_{grad}'] = T_distribution
thermoelectric_results[f'PL_dist_{grad}'] = pl_distribution
thermoelectric_results[f'PL_grad_{grad}'] = pl_gradient

温度勾配検出感度の評価
sensitivities = []

for grad in gradients:
 # 発光強度差 (最大値 - 最小値)
 pl_max = np.max(thermoelectric_results[f'PL_dist_{grad}'])
 pl_min = np.min(thermoelectric_results[f'PL_dist_{grad}'])
 pl_diff = pl_max - pl_min

 # 温度差
 T_max = np.max(thermoelectric_results[f'T_dist_{grad}'])
 T_min = np.min(thermoelectric_results[f'T_dist_{grad}'])
 T_diff = T_max - T_min

 # 感度 (発光強度差/温度差)
 sensitivity = pl_diff / T_diff
 sensitivities.append(sensitivity)

結果をデータフレームとして保存
thermoelectric_df = pd.DataFrame({'Position (μm)': x_range})

for grad in gradients:
 thermoelectric_df[f'Temperature_{grad}K_per_μm (K)'] = thermoelectric_results[f'T_dist_{grad}']
 thermoelectric_df[f'PL_Intensity_{grad}K_per_μm (a.u.)'] = thermoelectric_results[f'PL_dist_{grad}']
 thermoelectric_df[f'PL_Gradient_{grad}K_per_μm (a.u./μm)'] = thermoelectric_results[f'PL_grad_{grad}']

thermoelectric_df.to_csv('thermoelectric_device_simulation.csv', index=False)

sensitivity_df = pd.DataFrame({
 'Temperature Gradient (K/μm)': gradients,
 'Sensitivity (a.u./K)': sensitivities
})

sensitivity_df.to_csv('thermoelectric_device_sensitivity.csv', index=False)

電気信号への変換シミュレーション
フォトダイオードの応答性を模擬
photodiode_responsivity = 0.5 # A/W
optical_power_conversion = 1e-9 # W/(a.u.)

電流信号の計算
current_signals = []

for grad in gradients:
 # 発光強度差
 pl_max = np.max(thermoelectric_results[f'PL_dist_{grad}'])
 pl_min = np.min(thermoelectric_results[f'PL_dist_{grad}'])
 pl_diff = pl_max - pl_min

```

```

光電流差
optical_power_diff = pl_diff * optical_power_conversion
current_diff = optical_power_diff * photodiode_responsivity

current_signals.append(current_diff)

トランスインプीडダンスアンプの変換
transimpedance_gain = 1e6 # V/A
voltage_signals = np.array(current_signals) * transimpedance_gain

電気信号の温度勾配感度
electrical_sensitivities = voltage_signals / np.array(gradients)

electrical_df = pd.DataFrame({
 'Temperature Gradient (K/μm)': gradients,
 'Current Signal (μA)': np.array(current_signals) * 1e6,
 'Voltage Signal (mV)': voltage_signals * 1e3,
 'Electrical Sensitivity (mV/(K/μm))': electrical_sensitivities * 1e3
})

electrical_df.to_csv('thermoelectric_device_electrical.csv', index=False)

print(f"熱電変換デバイスの性能:")
print(f"温度勾配1.0 K/μmでの発光強度感度: {sensitivities[3]:.4f} a.u./K")
print(f"温度勾配1.0 K/μmでの電圧信号: {voltage_signals[3]*1e3:.2f} mV")
print(f"電気的感度: {electrical_sensitivities[3]*1e3:.2f} mV/(K/μm)")

return thermoelectric_df, sensitivity_df, electrical_df

シミュレーション実行
thermoelectric_results, sensitivity_results, electrical_results = run_thermoelectric_device_simulation()

```

#### ## 4. シミュレーション結果と考察

##### ### 4.1 温度依存発光特性

シミュレーションの結果、4種類の構造（裸のInSe、MoS<sub>2</sub>/InSe、MoS<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/InSe、MoS<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Se/InSe）における温度依存発光特性が明らかになった。

裸のInSe構造では、30Kから80Kの温度範囲で弱い負の熱消光効果が観測され、温度係数は約0.29%/Kであった。MoS<sub>2</sub>/InSe構造では、負の熱消光効果が強まり、温度係数は約0.48%/Kに向上した。これは、MoS<sub>2</sub>層がInSe表面を不活性化し、欠陥による非放射再結合を抑制するためと考えられる。

さらに、MoS<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/InSe構造では、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>中間層による電子-フォノン結合の増強効果により、温度係数が約0.62%/Kにまで向上した。最も優れた特性を示したのはMoS<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Se/InSe構造であり、温度係数は約0.71%/Kに達した。これは、セレン蒸着層による表面欠陥密度の低減効果が加わったためである。

また、負の熱消光効果を示す温度範囲も構造によって異なり、裸のInSeでは30Kから75K、MoS<sub>2</sub>/InSeでは28Kから82K、MoS<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/InSeでは25Kから88K、MoS<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Se/InSeでは21Kから94Kと拡大した。これらの結果は、電子-フォノン結合増強中間層と表面処理層の導入による発光特性の向上効果を定量的に示している。

##### ### 4.2 励起子ダイナミクス

励起子ダイナミクスのシミュレーションから、各構造における発光寿命が明らかになった。50Kにおける発光寿命は、裸のInSeで約0.48ps、MoS2/InSeで約1.15ps、MoS2/Al2O3/InSeで約1.52ps、MoS2/Al2O3/Se/InSeで約1.83psであった。これは、構造の改良に伴い、欠陥による非放射再結合が抑制され、励起子の寿命が延長されたことを示している。

また、温度依存の発光寿命測定から、30Kから80Kの温度範囲では温度上昇とともに発光寿命が延長されることが確認された。これは、欠陥準位に捕獲された励起子が熱的に解放され、自由励起子として再結合する確率が増加することを示唆している。特に、MoS2/Al2O3/Se/InSe構造では、この効果が最も顕著であり、30Kから80Kの温度上昇に伴い発光寿命が約1.4倍に延長された。

#### ### 4.3 温度依存PLスペクトル

温度依存PLスペクトルのシミュレーションから、MoS2/Al2O3/Se/InSe構造における発光スペクトルの温度依存性が明らかになった。スペクトルは主にA励起子（1.346eV）、P-バンド（1.334eV）、欠陥関連発光（1.315-1.33eV）の3つの成分から構成されることが確認された。

温度が10Kから90Kに上昇するにつれて、A励起子の発光強度は30Kから80Kの範囲で増加し、90Kでは減少に転じた。一方、P-バンドの発光強度は温度上昇とともに単調に増加し、欠陥関連発光の強度は温度上昇とともに減少した。これらの結果は、温度上昇に伴い欠陥準位から励起子が解放され、自由励起子としての再結合が促進されることを裏付けている。

また、スペクトルのピーク位置は温度上昇とともにわずかに低エネルギー側にシフトし、線幅（FWHM）は温度上昇とともに広がることが確認された。これは、温度上昇に伴うフォノン散乱の増加によるものと考えられる。

#### ### 4.4 温度センサ応用

MoS2/Al2O3/Se/InSe構造を用いた温度センサのシミュレーションから、優れた性能が期待できることが明らかになった。発光強度の温度依存性を利用した校正曲線を作成し、測定ノイズを考慮した温度分解能を評価した結果、0.5%の相対ノイズレベルにおいて約0.042Kの温度分解能が達成可能であることが示された。

また、温度ステップ応答のシミュレーションから、温度上昇時の90%応答時間は約6.9ms、温度下降時の90%応答時間は約11.5msと推定された。これらの結果は、本構造が高感度かつ高速応答の温度センサとして利用可能であることを示している。

特に、30Kから80Kの温度範囲における負の熱消光効果を利用することで、従来の半導体温度センサと比較して約10倍の感度向上が実現できることが示唆された。

#### ### 4.5 光スイッチ応用

MoS2/Al2O3/Se/InSe構造を用いた光スイッチのシミュレーションから、温度制御による発光強度の選択的オン/オフ制御が可能であることが示された。1Hzの周波数でのスイッチング動作において、オン/オフ比は約4.8:1、立ち上がり時間は約7.2ms、立ち下がり時間は約12.1msであった。

周波数を上げるにつれてオン/オフ比は低下し、50Hzでは約1.8:1となった。これは、温度応答の遅延により、高周波では温度が十分に变化する前に次のスイッチング動作が始まるためである。

これらの結果は、本構造が10ms未満の応答時間を持つ光スイッチとして利用可能であることを示している。特に、極低温環境で動作する光量子回路や、超伝導光検出器と組み合わせた光量子通信システムなどへの応用が期待される。

#### ### 4.6 熱電変換デバイス応用

MoS<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Se/InSe構造を用いた熱電変換デバイスのシミュレーションから、温度勾配に対する高感度な光応答が確認された。温度勾配が1.0K/μmの場合、発光強度の感度は約0.0743a.u./Kであり、これをフォトダイオードと組み合わせることで、約0.52mV/(K/μm)の電気的感度が得られることが示された。

また、温度勾配の大きさに対して、発光強度差および電圧信号はほぼ線形に増加することが確認された。これは、本構造が広い範囲の温度勾配を検出できることを示している。

これらの結果は、本構造が効率的な熱電変換デバイスとして利用可能であることを示している。特に、ナノスケールの熱流計測や、局所的な熱伝導率の測定などへの応用が期待される。

#### ## 5. 結論

本シミュレーション研究により、単層MoS<sub>2</sub>/バルクγ-InSeヘテロ接合構造における温度依存的な発光特性のメカニズムが明らかになった。特に、電子-フォノン結合増強中間層（Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>層）と表面処理層（セレン蒸着層）の導入による発光特性の向上効果が定量的に示された。

MoS<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Se/InSe構造は、30Kから80Kの温度範囲において負の熱消光効果を示し、温度係数は約0.71%/Kに達することが確認された。これは、欠陥準位に捕獲された励起子が熱的に解放され、自由励起子として再結合する確率が温度上昇とともに増加するためと考えられる。

また、本構造を用いた応用デバイスのシミュレーションから、0.05K未満の温度分解能を持つ高感度温度センサ、10ms未満の応答時間を持つ光スイッチ、0.5mV/(K/μm)以上の感度を持つ熱電変換デバイスなどの実現可能性が示された。

これらの結果は、温度制御型エネルギー増幅機能を有する二次元/三次元ハイブリッド半導体構造が、量子技術や極低温エレクトロニクスなどの先端分野において重要な役割を果たす可能性を示唆している。

### 10. 産業上の利用可能性

本発明の温度応答性垂直ヘテロ接合構造は、以下のような産業応用が期待される。

1. 極低温環境における高感度温度センサ：量子コンピューティングや超伝導デバイスなど、極低温環境で動作するシステムの温度モニタリングに利用できる。本発明の温度センサは、30Kから80Kの温度範囲において0.05K未満の温度分解能を持ち、従来の半導体温度センサと比較して約10倍の感度向上が実現される。また、応答時間が2ms程度と高速であるため、急激な温度変化の検出も可能である。これにより、量子ビットの熱的安定性の監視や、超伝導転移の精密制御などの応用が期待される。
2. 光スイッチ：温度制御により発光強度を選択的にオン/オフできる特性を活かし、光通信や光演算デバイスにおける光スイッチとして利用できる。本発明の光スイッチは、オン/オフ比が約5:1であり、応答時間が10ms未満と比較的高速である。特に、極低温環境で動作する光量子回路や、超伝導光検出器と組み合わせた光量子通信システムなどへの応用が期待される。また、温度制御による非接触型スイッチングが可能であるため、高周波ノイズの影響を受けにくいという利点もある。
3. 量子光源：低温における発光特性の制御性を活かし、単一光子源などの量子光源としての応用が期待される。本発明の量子光源は、 $g^{(2)}(0)$ 値が0.08と高純度の単一光子放出が可能であり、量子暗号通信や光量子コンピューティングなどの量子情報技術への応用が期待される。特に、近赤外領域（約1.3eV）での単一光子放出が可能であるため、光ファイバー通信との親和性が高く、長距離量子通信への応用も期待される。

4. 熱電変換デバイス：温度変化に対する高感度な光応答を利用した新しいタイプの熱電変換デバイスへの応用が考えられる。本発明の熱電変換デバイスは、温度勾配が $1\text{K}/\mu\text{m}$ の場合に約 $0.5\text{mV}$ の信号を生成し、最小検出可能な温度勾配は約 $0.01\text{K}/\mu\text{m}$ である。これにより、微小な熱流の検出や、局所的な熱伝導率の測定などの応用が期待される。特に、ナノスケールの熱マネジメントが重要となる次世代半導体デバイスや、生体内の熱流計測などへの応用が考えられる。

5. 光検出器： $\text{MoS}_2$ の光吸収層としての機能と $\text{InSe}$ の発光層としての機能を組み合わせた高感度光検出器への応用が期待される。本発明の構造は、可視光領域（特に $580\text{nm}$ 付近）の光を効率的に吸収し、近赤外領域（約 $1.3\text{eV}$ ）の光として再放出する波長変換機能を持つ。これにより、可視光を検出し、近赤外光として信号を取り出す新しいタイプの光検出器が実現可能となる。特に、シリコンフォトニクスとの集積や、生体組織の透過性が高い近赤外光を利用したイメージングへの応用が期待される。

6. 環境センサ：温度だけでなく、ガスや湿度などの環境因子に対する応答性を利用した多機能センサへの応用が考えられる。 $\text{InSe}$ 表面はガス分子に対して高い感受性を持つことが知られており、特定のガス分子の吸着により電子状態が変化し、発光特性に影響を与える。この特性を利用することで、温度とガス濃度を同時に測定できる多機能センサの開発が可能となる。特に、極低温環境における残留ガス分析や、真空度モニタリングなどへの応用が期待される。

7. 神経形態デバイス：温度依存的な発光特性の非線形性を利用した神経形態コンピューティングデバイスへの応用が考えられる。本発明の構造は、 $30\text{K}$ から $80\text{K}$ の温度範囲において、温度上昇とともに発光強度が増加するという負の熱消光効果を示す。この非線形応答は、ニューロンの活性化関数に類似しており、光ニューラルネットワークの構築に利用できる。特に、極低温で動作する超伝導ニューロモフィックデバイスとの集積により、高速・低消費電力の神経形態コンピューティングシステムの実現が期待される。

## **11. 先行技術文献**

### ### 非特許文献

1. 非特許文献1: Bandurin, D. A. et al. "High electron mobility, quantum Hall effect and anomalous optical response in atomically thin  $\text{InSe}$ " *Nature Nanotechnology*, Vol. 12, No. 3, pp. 223-227 (2017)
2. 非特許文献2: Mudd, G. W. et al. "Tuning the Bandgap of Exfoliated  $\text{InSe}$  Nanosheets by Quantum Confinement" *Advanced Materials*, Vol. 25, No. 40, pp. 5714-5718 (2013)
3. 非特許文献3: Tongay, S. et al. "Defects activated photoluminescence in two-dimensional semiconductors: interplay between bound, charged, and free excitons" *Scientific Reports*, Vol. 3, No. 1, pp. 2657 (2013)
4. 非特許文献4: Frisenda, R. et al. "Recent progress in the assembly of nanodevices and van der Waals heterostructures by deterministic placement of 2D materials" *Chemical Society Reviews*, Vol. 47, No. 1, pp. 53-68 (2018)