

# 教師なし機械学習と第一原理計算を用いた単一分子接合の架橋構造解析

## Study on anchoring configurations in single molecular junctions by combining unsupervised machine learning and first-principles calculations

阪大基礎工<sup>1</sup>, 阪大産研<sup>2</sup> ○大戸達彦<sup>1</sup>, 沼井優一<sup>1</sup>, 井上拓也<sup>2</sup>, 美濃出圭悟<sup>1</sup>, 徳本潤平<sup>1</sup>,  
山田亮<sup>1</sup>, 家裕隆<sup>2</sup>, 安蘇芳雄<sup>2</sup>, 夢田博一<sup>1</sup>

Σ-Osaka Univ.<sup>1</sup>, ISIR-Osaka Univ.<sup>2</sup>, ○T. Ohto<sup>1</sup>, Y. Numai<sup>1</sup>, T. Inoue<sup>2</sup>, K. Minode<sup>1</sup>, J. Tokumoto<sup>1</sup>,  
R. Yamada<sup>1</sup>, Y. Ie<sup>2</sup>, Y. Aso<sup>2</sup>, H. Tada<sup>1</sup>

E-mail: ohto@molelectronics.jp

単分子接合の電子物性は、ブレイクジャンクション (BJ)法により実験的に測定が可能となった。最近では、単純な直流電気伝導度に加え、電流-電圧 ( $I$ - $V$ )特性など多角的な測定が行われるようになり、得られる情報も多次元化している。BJ法の測定結果は膨大な量となることに加え、様々な準安定な構造に対する結果が混在する。このため大量の多角的な測定量を統合的に整理し、意味のある情報を引き出す方法が必要である。本研究では教師なし学習により  $I$ - $V$  特性の分類を行った。

図(a)に測定に用いた分子の構造を示す。三脚型のチオフェン末端アンカーのうち、一本は、分子骨格部分にまで  $\pi$  電子系が接続されている [1]。この分子に対して金を電極としたブレイクジャンクション法により 100 K,  $N_2$  雰囲気中で測定された  $I$ - $V$  特性の結果[2]を教師なし機械学習 (K-Means) により解析した。

特徴量に、電気伝導度 ( $G$ )と  $I$ - $V$  特性を図(b)のように単一軌道のトンネリングモデル[3]でフィットして得られた左右の電極とのカップリング比  $\Gamma_L/\Gamma_R$  を利用した。図(c)にクラスごとに色分けした  $G$  のヒストグラムを示す。 $\Gamma_L/\Gamma_R \sim 1$  (対称: 青)と  $\Gamma_L/\Gamma_R < 1$  程度 (非対称: 緑)、 $\Gamma_L/\Gamma_R \ll 1$  (例外的: 赤) の、3つのクラスに分けることができた。この結果から、対称的な構造は、 $G = 10^{-2} G_0$  (①)と  $G = 10^{-4} G_0$  近辺 (②④) のコンダクタンス値をもつ二種類が存在し、非対称構造は、 $G = 10^{-4} G_0$  (③) 電気伝導度を持つ一種類が存在することが明らかとなった。

架橋構造を推測するために電極間の距離を変えて第一原理計算を行った結果、図(d)に示すように、左右電極との接合の強さが異なる4つの安定な架橋構造が得られ、その伝導度の計算値は実測の伝導度ヒストグラムと定性的に一致していた。このように、教師なし機械学習によるクラスタリングは、BJデータを多角的に分析し測定結果に現れた分子接合の構造を理解する上で非常に有用である。

### 【参考文献】

- [1] Yutaka Ie et al., *JACS*, **133**, 3014 (2011), Yutaka Ie et al., *JPCL*, **6**, 3754 (2015).
- [2] 沼井優一ら、第65回応用物理学会春季学術講演会[17p-F104-9]
- [3] R. Matsusita et al., *JPCC*, **117**, 1791 (2013).

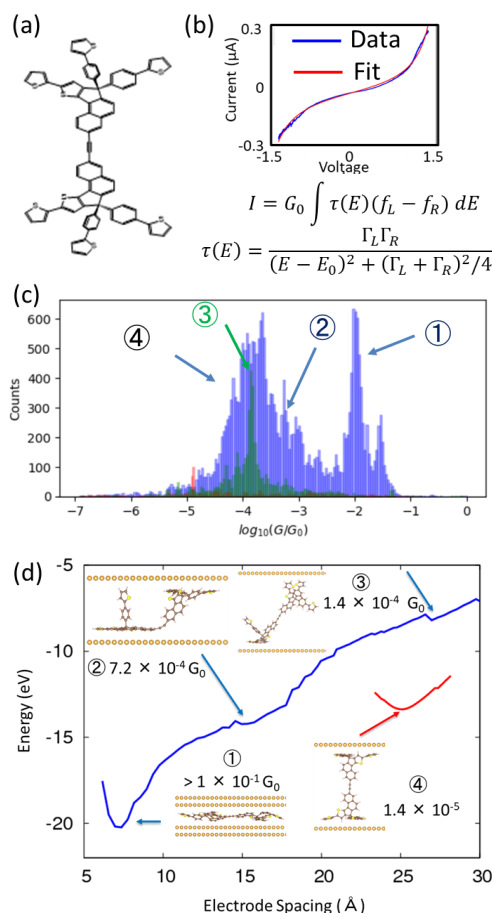


図 (a)分子構造。(b)電流電圧特性のフィッティング。(c)対称(青)・非対称(緑)・例外(赤)に分けたクラス毎の伝導度ヒストグラム。(d)第一原理計算による安定構造と伝導度