

STM-BJ 法を用いた単一分子接合の電気伝導度データの 自動分類に向けたクラスタリング手法の開発

Development of a clustering method for automatic classification of electrical
conductance data from single molecule junctions measured via STM-BJ method

阪大基礎工¹, 阪大院基礎工² ◯(B)荻野 旭¹, 山田 亮², 夢田 博一²

School¹/Grad. School² of Engineering Science Osaka University

◯Kyo Ogino,¹ Ryo Yamada² and Hirokazu Tada²

E-mail: ogino_k@molelectronics.jp

1. 目的 単一分子接合における電子輸送特性はブレイクジャンクション法 (BJ 法) の登場により盛んに調べられるようになった [1]。BJ 法では、数万におよぶ膨大なデータを分類し解析する必要がある。教師なし機械学習 (クラスタリング) は、このようなデータの分類に有用な方法である [2]。しかし、クラスタリングの結果は特徴量の選び方に依存してしまうという問題がある。本研究では特徴量を自動で抽出できるクラスタリング手法 (深層オートエンコーダ: DAE) と Uniform Manifold Approximation and Projection (UMAP) による次元削減を利用した汎用的なクラスタリング手法を開発した。

2. 方法と結果 Figure 1 に手順を示す。先行研究に倣い [3, 4]、単一分子接合の電極間隔を広げる時の電流の変化 (BJ データ) を 32×32 ピクセルの画像に変換したものを深層ニューラルネットワーク (DNN) の入力データとして用いた (Fig.1a)。DNN の出力が入力を再現するようにトレーニングを行い、トレーニング後の DNN の中間層に現れる 64 個の値を特徴量として抽出した (Fig.1b)。本研究では、視覚的に理解しやすくするために、UMAP による次元削減を行ったうえでクラスタリングを実行し、二次元分布で表現した (Fig.1c)。

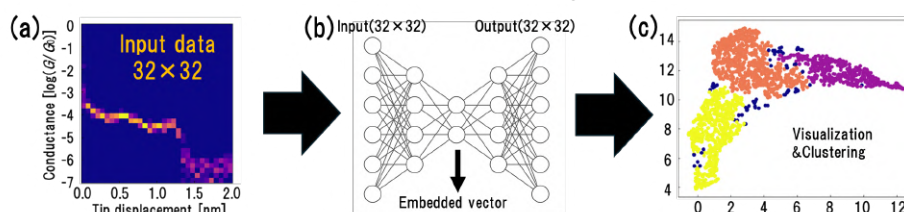


Figure 1. Overview of the method. (a) A single BJ data plot is converted to a 32×32 pixel image and used as input data. **(b)** The input data is processed through a trained deep autoencoder, and the values at the bottleneck layer of the DNN are used as an embedded feature vector (indicated by the arrow). **(c)** The UMAP algorithm is applied for the additional dimensionality reduction to two dimensions, followed by clustering. The result is shown as a 2D scatter plot.

Figure 2 に実験で得られた 2000 個の BJ データに対して適用した例を示す。Figure 2(a) はクラスタリングされたデータの二次元分布図、Fig.2(b) に 2000 トレースをすべて使った二次元ヒストグラムを、Fig.2 (c), (d), (e) にクラスごとに得られた二次元ヒストグラムを示す。Figure 2(b) を見ると、分子接合をもつクラスと持たないクラスに分かれると予想されるが、クラスタリングを行うと、分子接合には Fig.2(d) と Fig.2(e) のような 2 パターンが存在することがわかり、細かい特徴まで適切に捉えたクラスタリングが行えていることが示された。

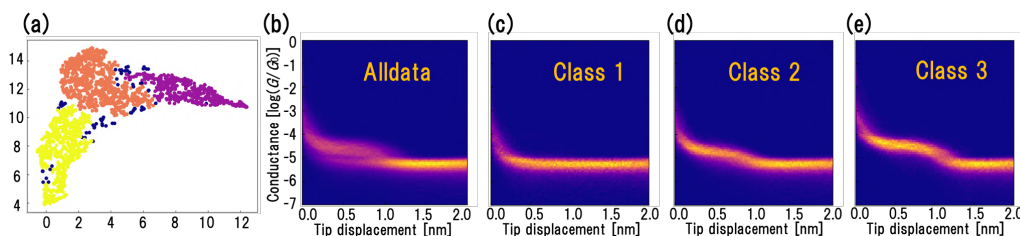


Figure 2. (a) Clustering results. **(b)** Conductance-distance 2D histogram of the entire dataset, **(c-e)** 2D histograms for individual datasets.

[1] S. V. Aradhya et al., Nature Nanotechnology 8, 399–410 (2013).

[2] C. Yan et al., ACS Nano 18, 28531–28556 (2024).

[3] D. Cabosart et al., Appl. Phys. Lett. 114, 143102 (2019).

[4] F. Huang et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 22, 1674 (2020).