

# 金接合領域の伝導度解析によるオクタンジチオール分子接合形成予測

## Prediction of octanedithiol molecular junction formation from the conductance behavior of the metallic junction

阪大産研,<sup>o</sup>福原 岳, 小本 祐貴, 谷口 正輝

Osaka Univ. SANKEN,<sup>o</sup>Gaku Fukuhara, Yuki Komoto, Masateru Taniguchi

E-mail: gaku.fukuhara32@sanken.osaka-u.ac.jp

単分子測定は、ナノテクノロジー技術を用いて作製された金属ナノギャップ間の単一分子の伝導度を測定する手法である。単分子測定は、生体分子の解析や分子デバイスへの応用が期待されている。しかし、単分子測定では分子の架橋率が低く、デバイスへの応用や、分析のためのデータ収集が困難という課題がある。分子の架橋率を向上させるためには、接合形成プロセスのさらなる理解が必要である。先行研究では分子接合が金属接合の破断前に形成されることが示唆されているが、正確な予測は報告されておらず、分子接合を形成する金属接合破断プロセスも明らかになっていない。そのため本研究では、分子接合が形成しやすい電極形成プロセスを解明し、金属接合の挙動と分子接合形成の関係を明らかにすることを目的とした。

単一分子測定のモデル分子である 1,8-オクタンジチオールの伝導度を、微細加工技術を用いて作製された Mechanically Controllable Break Junction (MCBJ) 基板を用いて測定した。それぞれの伝導度トレースを金属伝導度領域と分子伝導度領域に分離した後、金属領域の伝導度トレースを伝導度ヒストグラムに変換し、これを予測のための特徴量としてランダムフォレスト分類器を学習し、接合形成を予測するモデルを構築した。

伝導度トレースにプラトーが観測され、伝導度ヒストグラムでは  $10^4 G_0$  付近に明確なピークが現れた。22%の伝導度トレースではプラトーが見られる一方で、78%伝導度トレースでは見られなかった。ここで、金接合領域の伝導度から伝導度トレースにおけるプラトーの出現を予測する機械学習モデルを構築した。図 1 は、予測結果を表す混同行列を示している。プラトーの出現は 91%の精度で予測に成功した。この結果は、分子接合の形成が金属接合の形成プロセスに依存していることを明確に示している。分子接合を形成する金属接合構造を推測するために、予測における伝導度の重要性を調査した。機械学習モデルの結果から、伝導度ヒストグラムの 7~8  $G_0$  の範囲のカウントが大きく寄与していることが明らかになった。この結果から、7~8  $G_0$  で電極に分子が架橋し、接合が維持されたままギャップ形成され分子のプラトーが観測されたと考えられる。

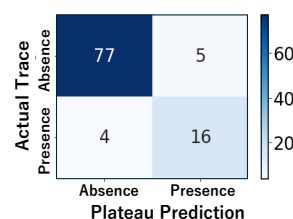


図 1 分子接合形成予測結果の混同行列