# 有機グラフォエピタキシーの分子動力学シミュレーション 1 - 系のモデル化と予察的計算結果 -

## **Molecular Dynamics Simulations of Organic Graphoepitaxy 1**

## - Modeling of the System and A Preliminary Result -

### <sup>O</sup>池田 進(東北大 WPI-AIMR)

### <sup>°</sup>Susumu Ikeda (WPI-AIMR, Tohoku Univ.)

#### E-mail: sikeda@m.tohoku.ac.jp

グラフォエピタキシーは、人工的に作製した基板表面の微細な凹凸構造に対して、ある特定の面 内方位をもつ結晶薄膜が成長する疑似的なエピタキシー現象であり、1970年代に無機材料の分野 で見出された [1] 。現在では、人工的に作製した構造に限定せず、原子・分子ステップも含め、 基板表面の凹凸に起因する面内配向成長全般を指す用語となりつつある。講演者らは、熱酸化膜 付きシリコン基板表面に電子線リソグラフィーを用いて形成した周期的溝構造(ピッチ 400 nm、 深さ 10 nm) 上において、有機半導体α-sexithiophene (6T) がグラフォエピタキシャル成長するこ とを報告 [2] するとともに、表面の親水性(UV/オゾン処理)、疎水性(HMDS 処理)の違いに よって面内配向方位が 90°異なるなど、有機分子系特有のグラフォエピタキシー現象が存在するこ とを示した [3]。また、電極(金属)のエッジに誘起された面内配向成長も見出している[4]。グ ラフォエピタキシーによって完全な面内配向制御が可能となれば、有機トランジスタの移動度向 上に寄与できるが、現状ではランダム方位の成分も多く存在することから、本現象を実用的な薄 膜作製技術へと高めるためには、メカニズムを解明し、制御すべき主要因を明らかにする必要が ある。講演者は、核形成や面内方位が定まるタイミングなど、グラフォエピタキシーの分子レベ ルでの素過程を分子動力学(MD)シミュレーションで探究できるのではないかと考えた。本講演 では、予察的に行った一連の作業(基板のモデル化、分子間や分子-基板間のポテンシャル設定等) と計算結果を紹介する。SiO2表面を水酸基-OHで終端した場合(親水性)と、トリメチルシリル 基-Si-(CH<sub>3</sub>)3で終端した場合(疎水性)のシミュレーションを行ったところ、実験結果から考察 されていた構造モデルと定性的には調和する結果が得られ、MD シミュレーションで有機グラフ オエピタキシーのメカニズムを追究できる可能性を示すことができた(Fig. 1, 2)。

参考文献: [1] H.I. Smith and D.C. Flanders, *Appl. Phys. Lett.* **32**, 349 (1978); M.W. Geis, D.C. Flanders and H.I. Smith, *Appl. Phys. Lett.* **35**, 71 (1979); H.I. Smith, M.W. Geis, C.V. Thompson and H.A. Atwater, *J. Cryst. Growth* **63**, 527 (1983); E.I. Givargizov, *J. Cryst. Growth* **310**, 1686 (2008). [2] S. Ikeda, K. Saiki, K. Tsutsui, T. Edura, Y. Wada, H. Miyazoe, K. Terashima, K. Inaba, T. Mitsunaga and T. Shimada, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 251905 (2006). [3] S. Ikeda, K. Saiki, Y. Wada, K. Inaba, Y. Ito, H. Kikuchi, K. Terashima and T. Shimada, *J. Appl. Phys.* **103**, 084313 (2008). [4] S. Ikeda, Y. Wada and K. Saiki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **49**, 04DK19 (2010).



**Fig.1** (left) Structure and orientation of a 6T crystal grown on grooved surface after UV/ozone treatment (determined by XRD). (right) A result of MD simulation in a groove whose surface is terminated with hydroxyl group –OH. (60 6T molecules;  $0.5 \text{ fs} \times 50,000 \text{ steps} = 25 \text{ ps}$ )



**Fig.2** (left) Structure and orientation of a 6T crystal grown on grooved surface treated with HMDS (determined by XRD). (right) A result of MD simulation in a groove whose surface is terminated with trimethylsilyl group  $-Si-(CH_3)_3$ . (60 6T molecules; 0.5 fs × 50,000 steps = 25 ps)