

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 3 - 分子堆積過程のシミュレーション -

Molecular Dynamics Simulations of Organic Graphoepitaxy 3

- Simulations of the Deposition Process of Molecules -

○池田 進 (東北大 WPI-AIMR)

○Susumu Ikeda (WPI-AIMR, Tohoku Univ.)

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

応用物理学会における過去2回の講演では、有機半導体 sexithiophene (6T) のグラフォエピタキシーを分子動力学法 (MD) によってシミュレートし、面内方位を決定している要因に関して考察した [1], [2]。実験[3]では、親水性表面 (UV/オゾン処理) では c 軸 $\perp$ 溝壁面の面内配向を、また、疎水性表面 (HMDS 処理) では c 軸//溝壁面の面内配向を示す結果が出ているが、MD シミュレーション結果によれば、面内方位が 90° 異なるこれら2つの配向構造は基板の表面状態に依らず両者とも安定であり、どちらの配向構造が優勢となるかは、核形成初期の分子配列 (分子面が溝壁面に対して垂直のものが多いか、平行のものが多いか) に依存することが示唆された。これらを総合すると、分子が基板に堆積する初期過程 (核形成以前) において、堆積の構造に何らかの違いが生じ、それが要因となって異なる面内配向へと発展するのではないかと考えられる。

そこで今回は、分子を一つずつ空間に発生させ、徐々に基板の溝に堆積させる動的なシミュレーションを行った。Fig. 1 は表面をヒドロキシ基 $-OH$ やトリメチルシリル基 $-Si-(CH_3)_3$ で修飾した溝のあるアモルファス SiO_2 基板に、60 個の 6T 分子を徐々に堆積させた MD シミュレーションの 20 ps、60 ps、100 ps におけるスナップショットを示したものである。分子の堆積が進行するとともに、壁面の影響も加わり、二種の基板上での分子集合構造に差異が生じた。この差異が、実験で認められる薄膜全体での配向構造の違いに発展するかの探究を進めている。

参考文献: [1] 池田 進「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 -」(14a-1E-4), 第76回応用物理学会秋季学術講演会 (2015). [2] 池田 進「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 2 -面内方位の変化を引き起こすメカニズム -」(19p-W242-3), 第63回応用物理学会春季学術講演会 (2016). [3] S. Ikeda, K. Saiki, Y. Wada, K. Inaba, Y. Ito, H. Kikuchi, K. Terashima and T. Shimada, *J. Appl. Phys.*, **103**, 084313 (2008).

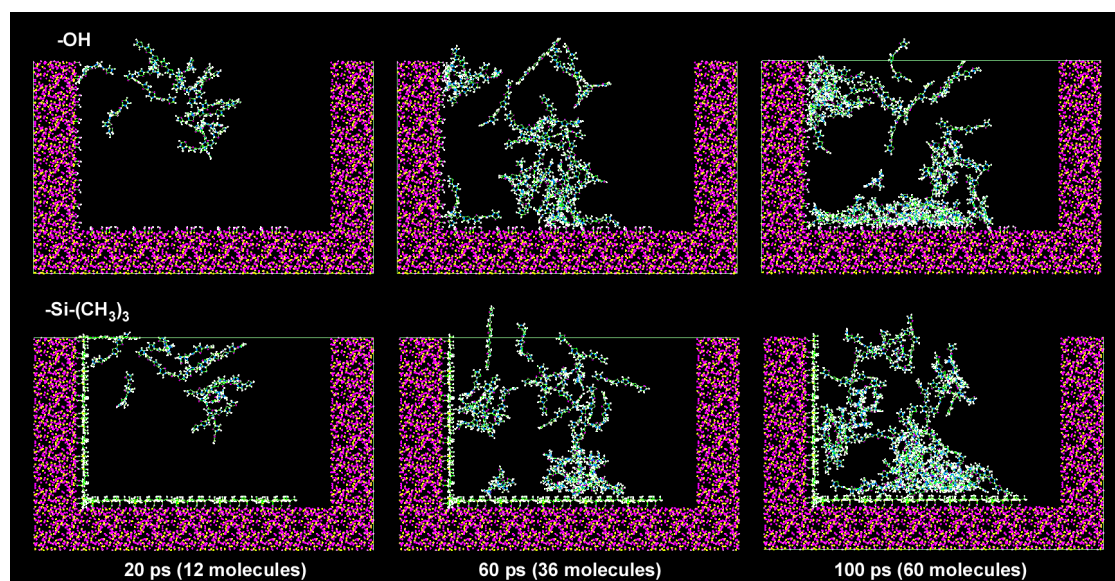


Fig.1 Snapshots of MD simulations of the deposition process of 6T molecules on grooved amorphous SiO_2 surface modified with hydroxy groups $-OH$ or trimethylsilyl groups $-Si-(CH_3)_3$.