

ペンタセン基板中の金属原子の拡散における金属原子間の相互作用： 第一原理計算による検討

First-principles Study of Metal-atom Interaction during Diffusion in Pentacene Substrate

千葉大理¹, ○(M2)渡邊 駿汰¹, 中山 隆史¹

Chiba Univ.¹, ○Shunta Watanabe¹, Takashi Nakayama¹

E-mail: adda1810@chiba-u.jp

軽量・ソフトで、生産が容易・低コストな有機分子半導体は、次世代の光・電子デバイス材料として期待されている。しかし、デバイスの作成・駆動時において、金属電極から有機基板内に金属原子が拡散侵入し、デバイス性能を劣化させることが知られている[1,2]。これまで我々は、金属原子の有機半導体基板への侵入過程や侵入後の金属原子の分布形態を、第一原理計算を用いて明らかにしてきた[3]。特に侵入後では、Au,Ag 原子はクラスターをつくるが、Al,Ti は分散して分子に吸着することが分かった。しかし、どのような過程を経てクラスター化したり分散化するかは明らかでない。そこで本研究では、既に侵入した原子がいる環境下で金属原子の拡散がどのように変化するか（つまり拡散における金属原子間の相互作用の効果）を、第一原理計算により検討した。

基板にはペンタセンを用い、金属としては Au と Al を考えた。1つ目の金属原子が最安定位置にいる時の2つ目の金属原子の拡散断熱ポテンシャルを、密度汎関数理論に基づく第一原理計算(VASP code)を用いて求めた。拡散経路としては、Fig.1(a)に示す、近接パス(path A)および1つ目の原子にぶつかるパス(path B)を考えた。

Fig.1(b)に計算結果を示す。Au の場合、単一原子の拡散と比べると path B ではエネルギーが低くなる。その原因は Au 原子間が結合するためである。一方 Al の場合、path A は単一原子の拡散に似ているが、path B ではエネルギーが高くなる。その原因は、path B ではイオン化した Al 間に斥力が働いているためである。一方、path A でもイオン化は起こるが、Al は周辺の3分子とイオン結合するため Al イオンによる双極子分極は周りに影響を与えず、あたかも相互作用がないように振る舞う。以上の結果から、Au の場合は、既に拡散していた Au 原子に近づくパスが有利であり、金属原子のクラスター化は促進される。一方、Al の場合は、近接のパスであれば自由に拡散できるため、金属原子の分散化が起こりやすいことが分かる。つまり、金属原子の最終的な分布形態に向けた拡散において、金属原子間の相互作用は有利に働いていることが分かる。

講演では、さらに複数の原子間の関係についても考察し、クラスター化および分散化につながる過程を議論する予定である。

[1] T. Sawabe et al. Appl. Phys. A, 95, 225 (2009). [2] J. H. Cho et al. Appl. Phys. Lett. 89, 132101 (2006). [3] Y. Tomita et al., J. Electronic Materials, 46, 3927 (2017).

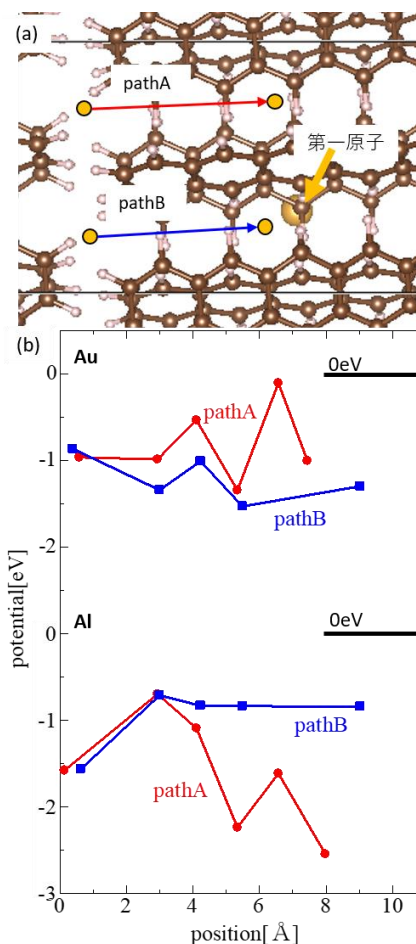


Fig.1 (a) Diffusion path of metal atom in pentacene substrate. (b) Calculated potentials for Au- and Al-atom diffusions in pentacene substrate, as a function of metal-atom position.