

**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 5(最終)**  
**– 溝の影響に関する総括と有機薄膜成長一般論への応用に向けた展望 –**  
**Molecular Dynamics Simulations of Organic Graphoepitaxy 5 (final)**  
**– Summary of the groove wall effect and prospect of application to film growth theory –**

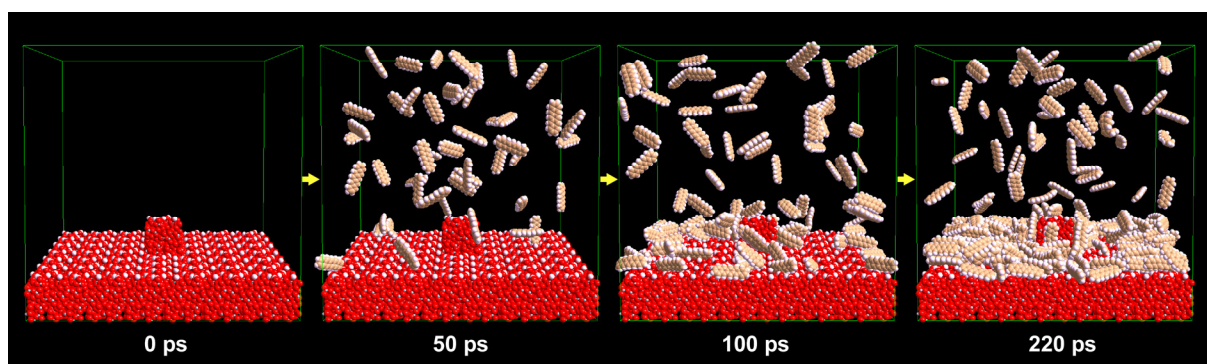
○池田 進 (東北大 WPI-AIMR)

○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4回の講演[1-4]では、 $\alpha$ -セクシチオフェン (6T) とペンタセンのグラフォエピタキシーに関して分子動力学 (MD) シミュレーションを用いて研究した結果を報告し、このほど、一連の結果を論文化した[5]。6T の MD シミュレーションでは、壁面に対して3つの安定な面内方位が存在する事がわかり、実験結果をよく説明することができたが、基板表面の親水性、疎水性の違いによる面内方位変化 (上記3方位の成分比率の変化) は MD シミュレーションで説明することができず、課題は残った。分子の堆積から核形成、結晶成長に至る過程のシミュレーションはペンタセンを用いて行い、堆積過程で複数分子が集合してヘリンボーン構造を形成し、結晶と呼べる大きさのクラスターを形成するところまでシミュレートする事ができた。特に、溝の底面に対して立った分子からなるクラスターが出現したことは、画期的な成果であると考えている。講演者は溝のない平坦基板上での分子堆積シミュレーションも数多く試みているが、未だ、分子が自発的に立って結晶を形成する状況の再現には成功していない。核形成は確率的な過程であり、立った分子からなる結晶核が MD シミュレーションで現れないのは、分子数や計算時間が現実の系に比べて小さいことが原因であると考えてきた。しかしこの度、グラフォエピタキシーの MD シミュレーションにおいて分子が立って核形成したことは、これまで信じられてきたものとは異なるメカニズムの存在を発想する機会をもたらしている。すなわち、基板表面上の欠陥や微小な凹凸などが、分子が立つきっかけになるのではないかと、という発想である。Fig. 1 に、中央に微小な突起のある平坦基板上にペンタセンを堆積させたシミュレーションの一例を示すが、大部分のペンタセン分子が基板吸着後すぐに基板との相互作用で寝てしまうのに対し、突起の周囲では、立った分子が多く存在することがわかる。寝た分子が優勢である状態から、どのタイミングで立った分子が優勢になるのか、など、有機半導体で普遍的に見られる現象でありながら、よくわかっていない分子レベルのメカニズムに関して、新たな知見が得られるかもしれない。

**参考文献** : [1] 第76回応用物理学会秋季学術講演会, 14a-1E-4 (2015). [2] 第63回応用物理学会春季学術講演会, 19p-W242-3 (2016). [3] 第77回応用物理学会秋季学術講演会, 16a-B5-6 (2016). [4] 第64回応用物理学会春季学術講演会, 14p-313-4 (2017). [5] Jpn. J. Appl. Phys. **57** (3S2), 03EG04 (2018) DOI: 10.7567/JJAP.57.03EG04



**Fig. 1** Some snapshots of MD simulations of the deposition process of pentacene molecules on the flat substrate with a protruded block. Periodic boundary conditions were applied in the horizontal direction.