

SAM 膜中での金属原子のクラスタリングと拡散: 第一原理計算による検討

First-principles study on clustering and diffusion of metal atoms in SAM film

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

有機材料は、軽量でフレキシブル・生産が容易で低コストといったメリットを持つため、様々なデバイスへの応用が期待されている。しかしデバイスの作成段階や使用時に、電極から有機基板内に金属原子が拡散・侵入することでリーク電流を発生させる等、デバイス性能を劣化させる[1]。特に絶縁膜として期待されているSAM 膜においては、供給された金属原子は表面から膜内部に侵入し、反対側の金属基板まで拡散する。また、膜内の残った金属原子はフィラメント状になり局所的なリークパスを作ることが指摘されている[2]。我々は前回の講演で、 π 電子系のペンタセン膜内での金属原子のクラスター形成過程や金属原子同士の衝突が拡散に与える影響を明らかにした。今回は、対象を σ 電子系のSAM 膜に絞り、SAM 膜内での金属原子のクラスター形成過程やクラスターの拡散過程を、第一原理計算を用いて調べた。

Fig.1(a)に SAM 膜中に吸着された Au(1)原子に別の Au(2)原子が近づく場合の拡散ポテンシャルを示す。Au(2)原子は拡散して Au(1)原子に近づき、金属結合により SAM 膜内でクラスターを作ることが分かる。次に、このクラスターから Au(1)原子が移動する場合の拡散ポテンシャルと Au(1)-Au(2)原子間距離を Fig.1(b)に示す。Au(1)原子のみが拡散しようとしても、Au(2)原子はほとんど距離を変えずに結合していて2つの原子が同時に動いていることが分かる。またこの時の拡散ポテンシャルにはバリアはほとんどない。この結果は、SAM 膜内で拡散している金属原子が遭遇して一旦クラスターを作ると、そのクラスターとして拡散が起こることを意味する。金属原子を電気陰性度の小さいAlに代えた場合にも、ほぼ同じ結果を得た。

講演では、より多数の金属原子がつくるクラスターの形成過程やその拡散を議論すると共に、クラスターが持つ電子状態の性質とリーク電流の関係について議論する予定である。

[1] T. Sawabe et al. Appl. Phys. A, 95, 225-232 (2009).

[2] J. H. Cho et al. Appl. Phys. Lett. 89, 132101 (2006).

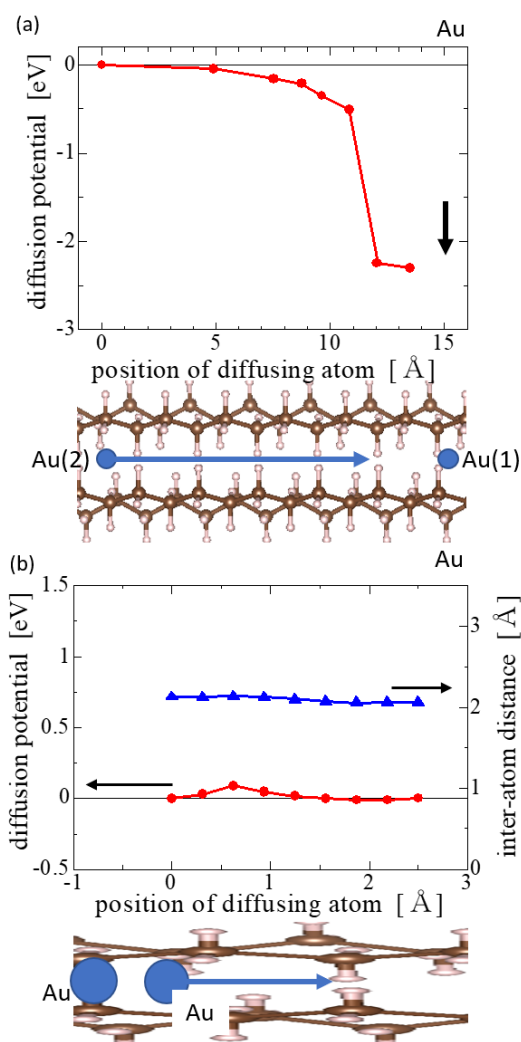


Fig1.(a) Calculated diffusion potential of Au(2) atom near Au(1) atom in SAM film. (b) Diffusion potential (red) of Au2 cluster and inter-atom distance (blue) during the diffusion.