République Algérienne Démocratique et Populaire Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université Hadj Lakhdar Batna Faculté de Technologie Département d'Électronique



THÈSE

Présentée pour l'obtention du diplôme de DOCTORAT en SCIENCES en Électronique

OPTION

Microélectronique

Par

Imad BENACER

Thème

Modélisation des transistors organiques

Soutenue devant le jury composé de :

Prof. Ramdane MAHAMDI	Université de Batna	Président
Prof. Zohir DIBI	Université de Batna	Rapporteur
Prof. Fayçal DJEFFAL	Université de Batna	Examinateur
Prof. Azzedine BELLAL	Université de Constantine	Examinateur
Prof. Azzedine TELIA	Université de Constantine	Examinateur
Prof. Abdelhafid CHAABI	Université de Constantine	Examinateur

Remerciements

Je souhaite remercier avant tout mon directeur de thèse Monsieur **DIBI Zohir** professeur à l'Université de Batna. Je retiens du professeur DIBI ses grandes qualités d'encadrement, n'a eu de cesse de m'encourager et de me soutenir durant toutes ces années. J'en profite pour lui exprimer ici ma plus profonde gratitude.

J'exprime également mes remerciements à Monsieur **MAHAMDI Ramdane**, Professeur au département d'Electronique de la Faculté de technologie de l'université de Batna, pour le grand honneur qu'il me fait en présidant le jury de thèse.

Mes remerciements vont également à Monsieur **DJAFFAL Fayçal** professeur à l'université de Batna, pour avoir accepté d'examiner ce travail et de participer au jury de ma thèse.

Je tiens également à présenter ma profonde gratitude à Monsieur BELLAL Azzedine, professeur à l'université de Constantine, Monsieur le Professeur TELIA Azzedine, de l'université de Constantine « 1 » et Monsieur CHAABI Abdelhafid, professeur à l'université de Constantine d'avoir fait partie du jury en qualité d'examinateurs et pour m'avoir honoré par leurs présence au jury.

Mes remerciements ne seraient pas complets si je n'exprimais pas ma profonde gratitude à toutes les personnes qui ont collaboré de près ou de loin à la réalisation de ce travail, en particulier, tout le personnel du département d'électronique à l'université de Batna, pour leur bonne humeur et leur disponibilité.

Enfin, je dois une dette certaine à ma famille et à mes parents, qui ont été mes plus fidèles supporteurs et qui m'ont aidé à traverser cette période.

Mr. Imad BENACER

بِسْمِ اللهِ الرَّحْمَٰنِ الرَّحِيمِ

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail fruit de plusieurs années de patience :

A ma chère mère symbole de tendresse, et à mon cher père symbole de sacrifice,

A mes sœurs Fahima, Chahira, Asma et Hana,

Toute ma famille et tous mes collègues,

A mes enseignants, lumières de mon chemin.

Résumé

L'utilisation des composés organiques comme matériaux actifs représente la prochaine génération technologique, cette nouvelle génération a dynamisé la recherche autour des transistors organiques à effet de champs (OFET) grâce à de nombreux avantages, et notamment : leur potentiel bas prix de fabrication et leur flexibilité. Cependant, les transistors organiques souffrent de nombreux défauts : courants faibles, l'injection de charges et la puissance dissipée, en dépit du développement et des progrès impressionnants dans leurs performances. De ce fait, la modélisation des dispositifs électroniques organiques constitue actuellement un axe de recherche très important et attractif à travers le monde. Ce travail porte sur la modélisation du transistor organique, le but d'une modélisation électrique est de remplacer un système complexe par un objet simple et de reproduire voire prédire ses comportements principaux (caractéristique I-V). Nous proposons un modèle analytique de la tension de seuil d'un transistor organique, le modèle prend en compte le profil de dopage gaussien du canal, un modèle physique bidimensionnel d'OFET a été développé à l'aide du logiciel SILVACO (ATLAS) de calcul par éléments finis, puis nous présentons un autre modèle analytique qui a été développé sur la base du modèle des transistors TFT et MOSFET et la méthode d'extraction des paramètres basés sur les algorithmes génétiques de ce modèle. Une autre approche réside dans le développement d'un modèle basé sur la théorie d'un système Neuro-flou (ANFIS) où la base de données est établie sur la base d'un modèle numérique via ATLAS, puis l'implémentation de ce dernier dans l'environnement de simulation PSPICE. Nos résultats sont comparés à des résultats expérimentaux, analysés et commentés de manière à pouvoir en tirer des conclusions pratiques pour la technologie organique. Les résultats acquis et les perspectives montrent l'intérêt de disposer d'outils de modélisation pour développer des composants ou des dispositifs performants à base d'OFETs.

Mots clés : Transistor Organique à Effet de Champ (OFET), modèle compact, les Algorithmes Génétiques (AG), SILVACO (ATLAS), Système d'inférence Neuro-Flou Adaptatif (ANFIS).

Abstract

The use of organic material as active layer represents the next generation of technology. Nowadays, the Field effect transistors (OFETs) have attracted much attention due to the low fabrication coast and the flexibility. However, dispute the actual stage of maturities of the OFET, this device has constantly well-known problems specifically the low field-effect mobility, poor charge injection and the high power dissipation. Hence, the modeling of organic electronics devices represents an interesting research field that is currently very important issue. In this work the channel Gaussian doping profile aspect has been proposed as a feature to achieve superior electrical performance. Our approach focuses on an analytical model development of the organic transistor threshold voltage incorporating the impact of the channel doping profile on the device electrical parameters. Hybrid approach based on both OFET analytical model exploiting the TFT and MOSFET transistors modeling methodology and parameters extraction approach using metaheuristic technique based on genetic algorithm optimization has also been proposed and investigated. In addition, the obtained results show a good agreement with experimental data. Moreover, Neuro-Fuzzy Inference System (ANFIS) has been used to model the electrical behavior of the organic transistor, where ATLAS numerical device simulator is used to formulate the data base. Besides, the obtained ANFISbased model has been implemented in the PSPICE simulation environment. Our results indicate the usefulness of the developed model to simulate the electrical behavior of many circuit designs.

Keywords: Organic Field Effect Transistor (OFET), compact model, Genetics Algorithms (GA), SILVACO (ATLAS), Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System (ANFIS).

ملخص

إن إستخدام المركبات العضوية كمواد نشطة يمثل الجبل القادم من التكنولوجيا نظرا لما تتمتع به من مرونة و تكلفة إنتاج ز هيدة ، وقد عزز هذا الجبل الجديد الأبحاث حول المقاحل العضوية تحت تأثير الحقل المغناطيسي. و على الرغم من التقدم والتطور في أداء المقحل العضوي، غير أنه لا يزال يواجه نقائص عدة. لذا، فإن نمذجة المركبات الإلكترونية العضوية يشكل حاليا محور أبحاث هامة مستقطبة في جميع أنحاء العالم. يركز هذا العمل على نمذجة الموكبات الإلكترونية العصل من النمذجة هو إستبدال نظام معقد بآخر بسيط لإعادة إنتاج أو التنبؤ بالسلوكيات الأساسية (ميزة تيار - جهد). في هذا العمل إقترحنا نموذج تحليلي لجهد العنبة الخاص بالمقحل العضوي، هذا النموذج يأخذ بعين الاعتبار تشويب قوس للقناة، نموذج تتائي الأبعاد للمقحل العضوي باستخدام طريقة العناصر المنتهية، كما تم إقتراح نموذج تحليلي أعتمد فيه أساسا على نماذج المقاحل الكلاسيكية بالإضافة إلى طريقة العناصر المنتهية، كما تم إقتراح نموذج تحليلي أعتمد فيه أساسا على نماذج المقاحل الكلاسيكية بالإضافة إلى طريقة العناصر المنتهية، كما تم إقتراح نموذج تحليلي أعتمد فيه أساسا على نماذج القراحها لتطوير نموذج يستند إلى نظرية نظام مزج الماطق الغامض-العصيبة من أجل إدراجه في بيئة برنامج محاكاة. تمت مقارنة نتائجنا مع النتائج التجريبية مع تحليلها ومناقشتها لاستخلاص بعض المعلومات المفيدة حول التكنولوجيا تمت مقارنة نتائجنا مع النتائج التجريبية مع تحليلها ومناقشتها لاستخلاص بعض المعلومات المفيدة حول التكنولوجيا العضوية. تشير النتائج المحققة والآفاق المستقبلية إلى أهمية النمذجة لتطوير كفاءة و أداء المركبات التي تستند في عملها العضوية. تشير النتائج المحققة والآفاق المستقبلية إلى أهمية النمذجة لتطوير كفاءة و أداء المركبات التي تستند في عملها

كلمات مفتاحيه : المقحل العضوي، النموذج المدمج، الخوارزميات الجينية، طريقة العناصر المنتهية، نظام مزج المنطق الغامض-العصيبة.

Sommaire

Intro	oduction générale	1
	Chapitre I : état de l'art sur la physique des semi conducteurs organiqu transistors organiques	les et les
I.1	Introduction	9
I.2	Les semi conducteurs organiques	9
I.3	Caractère semi conducteur des matériaux organiques	10
I.4	Origine des porteurs de charge	13
I.4	1.1 Dopage chimique	13
I.4	I.2 Injection	14
I.4	1.3 Photogénération	14
I.5	Nature des porteurs de charge	15
I.6	Transport des charges	17
I.6	5.1 Transport par bande	19
I.6	5.2 Transport par saut « Hopping »	21
I.6	5.3 Transport par piégeage et dépiégeage multiple (MTR)	23
I.6	5.4 Transport par modèle du désordre gaussien (GDM)	24
I.7	Transistor organique à effet de champ	26
I.8	Injection de porteurs de charges aux interfaces	27
I.9	Principe de Fonctionnement d'un OFET	
I.10	Géométries des OFETs	
I.11	Caractéristiques électriques d'un OFET	36
I.1	1.1 Caractéristique de sortie	
I.1	1.2 Caractéristique de transfert	
I.12	Extraction des paramètres	
I.1	2.1 Mobilité	
I.1	2.2 Tension de seuil	41
I.1	2.3 Rapport I_{On}/I_{Off}	43
I.1	2.4 Pente sous le seuil S	44
I.13	Influence du diélectrique de grille sur le fonctionnement des OFETs	45
I.1	3.1 Rugosité	45
I.1	3.2 Permittivité diélectrique	47
I.14	Effet de l'atmosphère ambiante	49
I.15	Conclusion	

Chapitre II : Modélisation analytique du $V_{Th}\,OFET$

II.1	Introduction	.52
II.2	Formulation du modèle	.52
II.3	Dérivation du potentiel de surface	.55
II.4	Dérivation de la tension de seuil	.55
II.5	La simulation numérique d'un transistor organique	.56
II.6	Influence du dopage des régions source-drain	.61
II.7	Conclusion	.69

Chapitre III : Modélisation et simulation du transistor organique par ATLAS

III.1	Introduction	71
III.2	Présentation d'ATLAS	71
III.3	Simulation avec les paramètres prédéfinis	72
III.4	Ajustement des paramètres pour la simulation	75
III	4.1 Modélisation de Piégeage	77
III	4.2 Modèle du transport	78
III.5	Profil du champ électrique et du potentiel	82
III.6	Distribution de la concentration des porteurs de charge	83
III.7	Caractéristiques de transfert en fonction de la longueur du canal	85
III.8	Conclusion	87

Chapitre IV : Modèle compact et extraction des paramètres

IV.1	Intr	oduction	88
IV.2	Des	cription du modèle OFET	90
IV	.2.1	Régime au-dessus du seuil	90
IV	.2.2	Régime sous le seuil	92
IV	.2.3	Modèle complet	93
IV.3	Ext	raction des paramètres	94
IV.4	Rés	ultats et discussions	97
IV.5	Cor	nclusion	07

Chapitre V : Modélisation du transistor organique par les techniques d'intelligence artificielle

V .1	Introduction	108
V.2	Réseaux de neurones artificiels	108

V.2	2.1	Architecture du réseau de neurones	109
V.2	2.2	Apprentissage des réseaux de neurones artificiels	110
V.2	2.3	Rétro-propagation du gradient	110
V.3	Mo	délisation du transistor organique à base des réseaux de neurones	111
V.4	Mo	délisation du transistor organique à base du système d'inférence flou	116
V.5	Mét	thodologie de modélisation par ANFIS	118
V.6	7.6 Résultats et discussions		
V.7	Imp	plantation du modèle ANFIS sur ORCAD-PSPICE	126
V.7	7.1	Inverseur organique	130
V.7	7.2	Porte NOR organique	133
V.8	Cor	nclusion	134
Conclusion générale			135
Références bibliographiques			

Notations et constantes

I _D	courant du drain
K _B	constante Boltzmann
q	charge électron
V _D	tension du drain
V _{DS}	tension drain-source
V _G	tension de grille
V _{GS}	tension grille-source
L	longueur du canal
W	largeur de la structure
ε ₀	permittivité diélectrique du vide, $\varepsilon_0 = 8,85.10^{-12} \text{ F/m}$
ε _{sco}	permittivité diélectrique du SCO
ε _i	permittivité diélectrique d'isolant
$\Phi_{ m M}$, $\Phi_{ m SCO}$	travaux de sortie respectivement d'un métal, d'un semi-conducteur organique
ϕ_B	différence entre le niveau de Fermi et le quasi niveau de Fermi en bandes plates
ϕ_{Bh}	hauteur de barrière d'injection
Т	température
C _i	capacité d'isolant
t _i	épaisseur d'isolant
t _{sco}	épaisseur du SCO
$\psi(\mathbf{x},\mathbf{y})$	potentiel électrostatique
$\psi_{ m s}$	potentiel de surface
N _A	concentration de dopants de type accepteur d'électrons
N _D	concentration de dopants de type donneur d'électrons
n _i	concentration intrinsèque du SCO
V _{FB}	tension de bande plate (« flat band » en anglais)
V_{Th}	tension de seuil
N _p	pic de la concentration du profil de dopage gaussien
R_p	parcours moyen projeté (centre de la fonction gaussienne)
σ_p	écart type de la fonction gaussienne
R _c	résistance de contact (source + drain)
R _{on}	résistance totale

R _{Ch}	résistance du canal
Eg	gap d'énergie
χ	affinité électronique
N _c	densité effective de la bande de conduction
N_v	densité effective de la bande de valence
g _{ch}	conductance du canal
g _{chi}	conductance intrinsèque du canal
I _{abv}	courant de drain dans le régime au-dessus du seuil
I _{sub}	courant de drain sous le seuil
V _{dse}	tension de drain effective
λ	paramètre de modulation du longueur de canal
V _{aa}	tension de renforcement de la mobilité
V _{sat}	tension de saturation
Von	tension de déclenchement « switch-on »
S	Pente sous le seuil
N _{bulk}	densité d'états dans le volume du semi conducteur
N _{int}	densité d'états d'interfaces
f	erreur moyenne quadratique RMS
\mathbf{W}_{kj}	poids des connexions reliant le neurone j au neurone k
$\mathbf{f}_{\mathbf{k}}$	sortie spécifiée par la règle floue
$O_{k,i}$	sortie d'un nœud i de la couche k (règle floue)
f _T	fréquence de coupure

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale

Depuis quelques années, l'électronique organique est devenue un champ de recherche majeur dans le domaine de la microélectronique. Ce nouveau champ de recherche communément appelé « électronique plastique » a connu un essor considérable. Les propriétés électroniques des matériaux organiques, traditionnellement considérés comme isolants, mais la naissance de l'électronique plastique depuis les années 70 a suscité une réelle impulsion dans le secteur de la microélectronique en offrant de nouvelles perspectives dans la réalisation de composants tout plastique bas coût. En effet, la découverte dans les années 1977 par Alan Heeger, Alan MacDiarmind et Hideki Shirakawa [1] de la propriété de conduction électronique dans les films de polyacétylène a ouvert un nouveau domaine de recherche. Leur recherche a été couronnée par le prix Nobel de Chimie en 2000.

L'électronique organique introduit des matériaux organiques à la place des semi conducteurs minéraux classiques. Ces matériaux présentent la possibilité d'être déposées en couches minces par des procédés de fabrication de la microélectronique, dans des conditions de bas prix, afin de réaliser des transistors [2], des diodes [3], des cellules solaires [4], des capteurs [5], on peut alors tout imaginer. Les matériaux organiques sont probablement dans la situation d'accomplir la prochaine révolution de l'industrie de l'électronique grâce à de nombreux avantages, et notamment : leur potentiel bas prix de fabrication, et le fait que le support de fabrication peut être à priori flexible comme le papier ou le plastique. Le futur est encore plus prometteur pour cette technologie, avec la perspective d'une nouvelle génération de dispositifs électroniques bas-prix, légers et flexibles, qui rempliront des fonctions traditionnellement accomplies par des composants plus chers basés sur des matériaux semi conducteurs conventionnels tels que le silicium. L'électronique deviendra alors souple, légère et potentiellement peu coûteuse.

Aujourd'hui, de nombreuses applications commerciales comme la cellule photovoltaïque organique (OPV), des écrans à base de diodes organiques électroluminescentes (OLED) intégrées dans des appareils photos numériques et téléphone mobile, autoradio ou encore dans des rasoirs électriques ont fait leur apparition sur le marché, et si la progression continue à ce rythme, cette électronique basée sur ces matériaux organiques devrait, à plus ou moins long terme, tenir une place importante dans les technologies de la vie quotidienne. Ce

développement des dispositifs a dynamisé la recherche autour des transistors organiques à effet de champs (OFET).

La flexibilité mécanique de ces matériaux est en effet une caractéristique importante pour certains domaines d'application comme ceux de la santé, la sécurité, et l'affichage. Malheureusement, quelques points posent encore problème. La faible mobilité des charges dans les semi conducteurs organiques (SCO) fait que les transistors organiques ne peuvent rivaliser avec les transistors à effet de champs à base de semi conducteurs minéraux monocristallins pour de nombreuses applications notamment celles qui demandent de grandes vitesses de commutation. Le composant élémentaire de tout dispositif électronique est le transistor. C'est pour cette raison que notre étude sera focaliser sur le développement de ce composant. Des applications de plus en plus nombreuses concernent désormais les transistors à effet de champ organiques (OFET) : les circuits radiofréquences pour la réalisation d'étiquettes intelligentes RFID (Radio Frequency Identification), circuits de commande pour les écrans OLED, des capteurs de gaz ou d'arômes (pour l'environnement, la sécurité, et la médecine), papiers électroniques, et des badges d'identification électronique. Les figures 1 et 2 présentent différents exemples d'applications des polymères semi conducteurs organiques.

<image>

Powerplastic de Konarka

Figure 1 : Applications des SCO dans le domaine des cellules Solaires Organiques (OPV).



Figure 2 : Applications des SCO dans le domaine d'affichage souple et papier électronique [6, 7].

RFID est le terme générique pour la technologie qui consiste à utiliser les ondes radio afin d'identifier d'une façon automatique des personnes, des animaux ou des objets. La méthode la plus répondue pour identifier un individu ou un objet repose sur le stockage d'un numéro d'identification ainsi que d'autres informations si nécessaire dans un microprocesseur relié à une antenne. Les RFID sont couramment utilisées dans les badges d'accès à des bâtiments, les clés électroniques de certaines automobiles, fixées sur une chaussure (épreuves sportives), la technologie RFID permet de suivre des espèces sauvages ou à celui du bétail et les dates d'expiration des produits.



Figure 3 : Modèle d'une étiquette RFID flexible sur substrat polymère [8].





(c)



(d)

(e)

Figure 4 : Autre applications de l'électronique organique; a) Textile intelligent b) carte à puce, c) capteur de gaz, d) bracelet médical, e) peau artificielle à base de capteurs de pression et température.

Selon une nouvelle étude de la société IDTechEx, l'électronique organique représentera en 2015 un secteur d'activités de 30 milliards de dollars. Ce chiffre d'affaires se réalisera, principalement, dans les domaines de logique/mémoire, de l'affichage et de l'éclairage. Toujours selon IDTechEx, le marché de l'électronique organique (au sens large du terme) passerait de 1,6 milliards de dollars (Mds \$) en 2008 à 47 Mds \$ en 2018. Selon une étude de Meryll Lynch la croissance serait plus lente (15 Mds \$ en 2020), mais pourrait être

exponentielle pour atteindre 300 Mds \$ en 2030, poussée par les fonctionnalités nouvelles et le besoin d'économie d'énergie et de métaux rares dans l'électronique [9].

La Figure 5 prédit qu'à moyen et long terme, en dépit des avancées dans la synthèse des matériaux, les mobilités des matériaux organiques ne dépasseront guère la dizaine de cm²/V.s. Ainsi, de nos jours, les dispositifs organiques atteindraient des mobilités comparables à leurs homologues en silicium amorphe.



Figure 5 : Prévision d'évolution des mobilités des semi conducteurs organiques pour des applications électroniques. Les mobilités du silicium amorphe et du silicium polycristallin sont données à titre de comparaison [10].

Cette technologie présente malgré tout certaines limites : Les matériaux organiques présentent des limites en terme de durée de vie, en particulier les matériaux optoélectroniques OLED et OPV [9], aussi l'électronique organique grande surface ne permet pas de réaliser des composants de forte densité de fonctions, elle est ainsi limitée en complexité et vitesse de fonctionnement.

L'étude des phénomènes de transport dans les semi conducteurs organiques est toujours une source de travaux importants. En effet, il n'existe pas de théories générales qui décrivent le transport de charge dans les semi conducteurs organiques, diverses études ont permis de dégager un certain nombre de phénomènes participant à la conduction électrique. De fait, le transport de charges dans les matériaux organiques est un phénomène très complexe. Leur comportement peut varier drastiquement suivant de nombreux paramètres physiques comme la température, la densité de porteurs, l'intensité du champ électrique, la distribution en énergie des porteurs, etc. On peut, néanmoins, dégager à l'aide de l'ensemble des travaux de recherche effectués jusqu'à ce jour, un certain nombre d'éléments essentiels à la compréhension des phénomènes de transport dans les SCO.

La compréhension des mécanismes de transport des charges dans les SCO est issue des modèles développés pour les SC inorganique, pour cette raison, les caractéristiques électriques I-V des transistors organiques sont modélisables de manière semblable à celles des transistors à effet de champ conventionnels.

La modélisation est un outil puissant permettant de reproduire mathématiquement le fonctionnement d'objets et de systèmes. Par fonctionnement, on entend l'évolution des variables électriques externes et des grandeurs physiques internes sous l'effet de différentes contraintes. La modélisation est basée sur les principes physiques régissant le comportement des semi conducteurs. De cette modélisation il a été créé des simulations numériques utilisées pour l'optimisation des transistors organique.

Tout modèle compact se doit d'être rigoureusement validé par rapport à des données expérimentales. Mais dans le cas présent, ces données expérimentales ne permettent pas toujours de bien comprendre la physique du dispositif. Dans ce cas présent, la simulation numérique se révèle plus intéressante, moins chère et plus souple, pour permettre un développement rapide du modèle.

La simulation numérique est en fait une adaptation de la modélisation mathématique aux moyens informatiques. Son principe de base est celui de la représentation du phénomène par une équation. L'un des intérêts d'un simulateur numérique est le gain de temps et le coût de développement. Ainsi, de nos jours, dans le but de réduire les coûts engendrés par une suite d'essais expérimentaux, les fabricants de circuits microélectroniques simulent les procédés avant de passer à la fabrication elle même. Un autre intérêt, la possibilité de visualiser des phénomènes physiques difficilement accessibles et donc observables. En effet, les simulateurs numériques fournissent une compréhension détaillée de l'aspect physique du fonctionnement des composants, ils ont une réelle capacité à prédire les caractéristiques électriques des dispositifs futurs. Pour ces raisons, ils sont employés soit pour étudier la physique et la conception du dispositif, soit comme moyen de validation, des modèles analytiques, par exemple. Nous utilisons dans notre cas Silvaco (ATLAS) comme outil de simulation ; celui ci est très connu dans le domaine de la simulation numérique. Le logiciel ATLAS-SILVACO est un outil reconnu dans la simulation physique des composants. Il permet à l'aide d'algorithmes à éléments finis de résoudre les équations aux dérivées partielles de la physique des semi conducteurs et ainsi de réaliser des simulations bidimensionnelles du comportement de composants électroniques. Aussi, la possibilité d'utilisation des techniques évolutionnaires dans le domaine de la modélisation et la simulation des composants microélectroniques, notamment sous forme des prédicteurs et des outils d'extraction des paramètres, s'avère nécessaire.

Problématique et objectifs

Le développement des transistors organiques repose généralement sur une approche expérimentale où les nouvelles idées sont testées sur des transistors réels. Cependant, les transistors organiques souffrent de nombreux défauts : courants faibles, l'injection de charges et la puissance dissipée, en dépit du développement et des progrès impressionnants dans leurs performances. La phase d'optimisation nécessite alors de passer en revue tous les paramètres clés qui sont susceptibles d'influencer les performances du dispositif. De ce fait, la modélisation des transistors organiques constitue actuellement un axe de recherche très important et attractif à travers le monde. Le principe d'un modèle est de remplacer un système complexe (OFET) en un objet simple reproduisant ses aspects ou comportements principaux (caractéristiques I-V). Les objectifs d'une modélisation sont donc multiples :

- améliorer la compréhension physique des résultats expérimentaux c'est-à-dire reproduire et prédire les courbes I-V ;
- améliorer les performances des structures (faible tension de fonctionnement, intégration de nouveaux matériaux.....);
- limiter le nombre d'échantillons à réaliser ;
- contrôler la qualité d'une production (prédiction des effets indésirables).

Ce manuscrit s'articule en deux parties. La première partie s'intéressera à l'état de l'art succinct de la physique des SCO et le principe de fonctionnement des transistors organiques. La deuxième est consacrée aux travaux de modélisation et aux simulations de ces transistors.

Le premier chapitre est consacré à quelques notions de base sur les semi conducteurs organiques, notamment leur structure, la notion de porteurs de charges, le transport des charges et les principaux modèles de transports associés. Nous présentons le principe de fonctionnement et les différents types de géométries rencontrées dans la technologie des transistors organiques, ainsi que les paramètres exploités. Les enjeux inhérents aux interfaces semi conducteur/diélectrique et semi conducteur/électrode y seront également détaillés.

Dans le deuxième chapitre, nous exposerons notre modèle analytique de la tension de

seuil d'un transistor organique. Ce modèle est basé sur une approche analytique par la résolution d'un système d'équations unidimensionnel (1D) de Poisson. Nous allons présenter l'expression de la tension de seuil en prenant en compte le profil de dopage gaussien du canal. Suite à cela, nous étudierons en particulier l'influence du dopage des régions source-drain, la hauteur de la barrière d'injection des charges aux électrodes, et la résistance de contact sur les caractéristiques électriques des transistors.

Dans le troisième chapitre, nous présenterons la simulation de transistors organiques à l'aide du simulateur technologique et électrique ATLAS par éléments finis 2D de Silvaco. Ensuite, nous réaliserons la simulation de transistors organiques en prenant en compte les paramètres rapportés dans la littérature afin de les comparer avec les résultats expérimentaux.

Le quatrième chapitre présente le modèle analytique du transistor organique avec les résultats obtenus et les discussions et les interprétations possibles. Ce modèle est basé sur une approche d'interpolation utilisé pour obtenir la continuité entre le régime au-dessus du seuil et le régime sous le seuil et cela pour le mode saturé et linéaire. Pour juger les performances du modèle, nous avons besoin en parallèle d'une moyenne d'estimer les valeurs de l'ensemble des paramètres. Pour cette raison, la modélisation est corrélée à l'extraction des paramètres. Ce travail présente le principe des techniques évolutionnaires (les algorithmes génétiques) pour l'extraction des paramètres d'un transistor organique.

Le dernier chapitre est consacré au développement d'une approche à base des techniques d'intelligence artificielle (ANN et ANFIS) pour la simulation des circuits électroniques organique. Nous nous somme intéressé en premier lieu à l'étude d'une approche à base des réseaux de neurones artificiels. Ensuite, on propose un modèle d'optimisation basé sur la théorie d'un système Neuro-Flou (*ANFIS*), nous utiliserons ce modèle pour réaliser une autre simulation grâce à un couplage avec une modélisation sous SPICE. C'est un modèle de type SPICE ou les caractéristiques sont simulés par l'implémentation des fonctions à l'aide de l'ensemble des équations ANFIS. La simulation tient compte de l'effet de la longueur du canal. Ce modèle a été créé pour faciliter la simulation des circuits électroniques organiques.

Nous terminons le manuscrit avec une conclusion générale qui fera la synthèse des principaux résultats obtenus dans le cadre de ce travail de thèse et quelques perspectives.

CHAPITRE I

ETAT DE L'ART SUR LA PHYSIQUE DES SEMI CONDUCTEURS ORGANIQUES ET LES TRANSISTORS ORGANIQUES

I.1 Introduction

L'électronique organique est une branche de l'électronique utilisant des composés carbonés possédant des propriétés semi-conductrices, se différenciant ainsi de l'électronique traditionnelle à base de composés inorganiques (Silicium, Germanium, etc...).

Dans ce premier chapitre général, nous allons donner un aperçu des différentes théories qui ont été formulées sur la physique des semi conducteurs organiques (SCO) en évoquant leurs spécificités, la notion de porteurs de charges et les différents modes de transport existant au sein de ces derniers. Puis nous allons aborder une description générale des transistors organiques (OFET) et de leur fonctionnement, les différentes géométries, les interfaces semi conducteur/diélectrique et semi conducteur/électrode.

I.2 Les semi conducteurs organiques

Les semi conducteurs sont des matériaux dont la conductivité électrique se situe à michemin entre celle des métaux et celle des isolants entre 10⁻⁸ S.cm⁻¹ et quelques S.cm⁻¹ (Siemens). Dans les domaines de l'électricité et de l'électronique, on pensait que les plastiques, autrement dit une certaine catégorie de matériaux organiques, étaient uniquement des isolants. Ce n'est plus vrai de nos jours.

Lorsque l'on parle d'électronique organique, deux types de composés sont abordés, les premiers à base de polymères et les seconds à base de petites molécules. La différence entre ces matériaux se situe au niveau de la taille de la molécule. Un polymère est une macromolécule dont la structure se répète régulièrement en de longues chaînes constituées d'entités élémentaires, les monomères. Les petites molécules regroupent des oligomères qui ne sont constitués que de quelques monomères. Leur fonctionnement physique est le même, seules les techniques de fabrication les différencient.

- Les polymères mis en œuvre par des techniques de type voie humide comme la tournette [11] ou le tirage [12] et plus récemment par d'autres méthodes comme le jet d'encre [13].
- Les petites molécules sont déposées par évaporation sous vide. Cette technique présente l'avantage de pouvoir donner des films de SCO minces relativement ordonnés améliorant les performances des composants, autrement dit la facilité de transfert de charges inter-moléculaire.

La figure I.1 représente les deux natures fondamentales de structures moléculaires rencontrées dans le domaine de l'électronique et de l'optoélectronique organiques.



Figure I.1 : Structure moléculaire des matériaux organiques conducteurs : a) petite molécule, b) polymère.

I.3 Caractère semi conducteur des matériaux organiques

L'électronique organique repose sur l'utilisation de matériaux dont la chimie est basée sur un squelette de carbone et d'hydrogène [14]. La plupart des semi conducteurs organiques sont des polymères "**conjugués** ". Dans ces matériaux, la structure de la molécule alterne les liaisons simples entre atomes de carbone et les liaisons doubles, c'est la nature des liaisons entre les atomes de carbones qui leur confère ce caractère semi conducteur. Il y a des matériaux organiques possédant des caractéristiques électriques (conducteur, semi conducteur, isolant et électroluminescent), donc, il est important de comprendre l'état dans lequel une matière organique peut se comporter comme un semi conducteur.

Les liaisons carbone-carbone, dites covalentes, lient deux atomes identiques et résultent d'un partage des électrons de valence qui se déplacent alors sur des orbitales moléculaires, obtenues par superposition des orbitales atomiques, communes aux deux atomes. L'atome de carbone possède quatre électrons de valence, qui se répartissent entre l'orbitale 2s et les trois orbitales 2p ($2p_x$, $2p_y$, $2p_z$). Cette liaison simple résulte du

recouvrement d'une des orbitales hybrides sp_3 de chaque atome de carbone. Ces liaisons (de type σ) assurent la cohésion du squelette du polymère, car elles sont très stables.

Les matériaux semi conducteurs organiques sont constitués d'oligomères ou polymères conjugués. Ces derniers présentent une alternance de liaisons simples (σ) et de doubles liaisons (σ + π). Dans la plupart des molécules conjuguées, l'origine de ces liaisons σ et π provient de l'association de deux atomes de carbone hybridés sp₂ : le recouvrement des orbitales atomiques (OA) sp₂ entre elles conduit à la formation d'orbitales moléculaires (OM) σ liantes et σ^* antiliantes alors que le recouvrement des OA de type p_Z conduit à une OM π liante et π^* antiliante (Figure I.2 (a) et (b)). Les électrons présents dans cette orbitale π peuvent passer librement d'un atome de carbone à un autre : ils sont délocalisés.



Figure I.2 : (a) Représentation des orbitales et des liaisons π et σ d'une molécule d'éthylène (C_2H_2), (b) Schéma énergétique de la liaison carbone-carbone dans le cas de l'hybridation sp2. (σ - et π représentent les orbitales moléculaires liantes, σ + et π + les anti-liantes), (c) motif benzène (C_6H_6) [15].

Quand on associe n atomes de carbone, leur interaction produit n orbitales moléculaires liantes et antiliantes, qui sont réparties en des ensembles disjoints, le système d'électrons π est alors complètement étendu sur toute la chaîne comme dans le cas du thiophène (figure I.2(c)). Un système d'électrons π délocalisés se crée sur l'ensemble de la molécule par recouvrement des orbitales $2p_z$, les électrons π correspondants ne sont pas assignés à un atome particulier : c'est le phénomène de conjugaison. Ce système continu d'électrons π est à l'origine de la conduction dans les matériaux organiques conjugués.

Dans le cas de la liaison π , la plus basse énergie π est dite liante, formant la bande de valence HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital), alors que la plus haute π^* est dite antiliante, formant la bande de conduction LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital). L'énergie nécessaire pour amener un électron du haut de la HOMO vers le bas de la LUMO est communément appelée gap (ou bande interdite) du polymère.

La délocalisation des électrons π confère au système des propriétés de polarisabilité et une rigidité augmentant avec la conjugaison. En effet, au fur et à mesure de l'allongement de la molécule, l'écart entre chacun des niveaux π (ou π^*) diminue, et la différence d'énergie entre les niveaux HOMO et LUMO diminue aussi [16]. A la limite de la chaîne infinie, les orbitales sont si proches qu'elles forment une bande d'énergie. On parle alors de bande de conduction (BC, ensemble des orbitales π^*) et de bande de valence (BV, ensemble des orbitales π) séparées par une bande interdite d'énergie E_g . Le modèle des bandes permet alors d'expliquer les propriétés originales des systèmes conjugués en phase solide. A noter que les orbitales moléculaires liantes (π) sont toujours pleines et les niveaux antiliants (π^*) vides.

Par analogie avec les semi conducteurs inorganiques (SCI), les bandes HOMO et LUMO permettent de définir le potentiel d'ionisation PI (la position du niveau HOMO par rapport au niveau du vide), l'affinité électronique AE (la position du niveau LUMO par rapport à celui du vide) et la largeur de la bande interdite ou band gap (Eg) comme étant la différence d'énergie entre les bandes permises (Figures I.3 et I.4).



Figure I.3 : Diagramme de l'évolution des orbitales moléculaires avec l'accroissement de la longueur de chaîne d'un polymère conjugué (cas du polyacétylène) [16].



Figure I.4 : Diagramme de l'évolution du Gap avec l'accroissement de la longueur de la molécule, allant du benzène au pentacène.

 A_g et A_c sont l'affinité électronique de la molécule dans la phase vapeur et dans le solide respectivement, Ig et Ic l'énergie d'ionisation, ΔE la largeur de la bande interdite et P_n et P_p sont l'énergie de polarisation acquis par les électrons et par les trous respectivement [17].

I.4 Origine des porteurs de charge

Les polymères conjugués semi conducteurs n'ont idéalement pas de charges mobiles en leur sein. Les charges qui transiteront au sein du matériau organique peuvent avoir plusieurs origines et peuvent être générées par différents processus.

I.4.1 Dopage chimique

Les impuretés dopantes ne sont pas introduites par substitution dans le réseau cristallin, comme pour les SCI, mais sont introduites à proximité de la chaîne. La conduction électronique et le transport des charges dans les semi conducteurs organiques nécessitent la création de porteurs de charges libres (Les molécules à système d'électrons π conjugués, sont pour la plupart intrinsèques i.e. sans porteurs de charges libres). Un système conjugué peut devenir conducteur par l'introduction de charges par « dopage » [18]. Ce processus correspond en fait à une réaction d'oxydation (création d'une charge positive) ou de réduction (création d'une charge négative). Au niveau moléculaire, ceci implique une ionisation facile : soit par éjection d'électrons des plus hauts niveaux électroniques occupés de la molécule (HOMO), soit par capture d'électrons dans les plus bas niveaux électroniques inoccupés (LUMO).

Le dopage peut ainsi permettre d'augmenter considérablement la conductivité pour atteindre des valeurs comparables à celles des métaux. La gamme de conductivité couverte par les polymères conjugués est comparée à celle des trois classes de matériaux inorganiques (métaux, semi conducteur et isolant) sur la figure I.5. La large gamme couverte s'explique par les différents taux de dopage.



Figure I.5 : Variation de la conductivité des principales familles de polymères conducteurs et comparaison de leur conductivité avec celle des matériaux inorganiques.

Les semi conducteurs organiques sont principalement utilisés sous forme non dopée, à l'exception des cas où le dopage est souhaitable pour certain applications [19, 20].

I.4.2 Injection

Dans la configuration d'une jonction métal polymère semi-conducteur, les charges peuvent être injectées directement à partir du métal sous l'application d'une tension (via un champ électrique depuis une électrode). Ce principe est utilisé pour les applications transistors et diodes électroluminescentes [21, 22]. L'enjeu pour ce type réside donc dans le choix des métaux pour former un contact le moins résistif possible (contact ohmique) avec le semi-conducteur organique en adaptant le dernier niveau occupé par les porteurs de charges (Niveau de Fermi E_F) à la HOMO pour l'injection de trous et la LUMO pour l'injection d'électrons.

I.4.3 Photogénération

Les porteurs de charges peuvent être générés lors de l'absorption d'un photon de longueur d'onde appropriée. Ce principe est utilisé dans le cas des cellules solaires photovoltaïques [23, 24]. L'absorption d'un photon de longueur d'onde équivalente à l'énergie du gap, créée une paire liée électron-trou appelée exciton. Un électron passe de la HOMO à la LUMO, laissant derrière lui un trou dans la HOMO. Sous l'effet d'un champ électrique, la paire électron-trou est séparée, générant ainsi une charge négative et une charge positive au sein du polymère semi conducteur qui pourront être transportées.

I.5 Nature des porteurs de charge

En réalité, l'apparition d'une charge sur la chaîne conjuguée ne se traduit pas directement par la présence d'un trou dans la bande HOMO (ou d'un électron dans la bande LUMO). L'introduction d'une charge provoque une déformation locale de la chaîne et crée un état localisé dans la bande interdite : on parle de défaut chargé localisé [25].

La majorité des polymères conjugués sont composés de cycles aromatiques, qui possèdent deux structures résonantes (aromatique et quinonique). La forme aromatique est plus stable. Lorsqu'une charge apparaît sur la chaîne, via un dopage ou une injection par un champ électrique, celle-ci va déformer la chaîne sur quelques unités monomères de telle sorte qu'une permutation des liaisons simples et doubles va avoir lieu, donnant naissance à une forme qui n'est plus du tout stable énergétiquement, c'est la forme quinonique.

Le défaut dû à l'injection de charge se crée par permutation des simples et doubles liaisons. Dès lors, deux cas peuvent se présenter. Si la perturbation conduit à une structure d'énergie différente, on parle de **système non dégénéré** car les deux formes résonantes (aromatiques et quinoniques en Figure I.6) ne sont pas équivalentes. Ce cas correspond à la majorité des polymères conjugués. Si par contre, la structure obtenue après permutation des liaisons a la même énergie, on parle de **système dégénéré**.



Figure I.6 : Comparaison des niveaux énergétiques des formes aromatique et quinonique (Système non dégénéré) [16].

Dans le cas des systèmes dégénérés, le défaut est une frontière entre deux demi-chaînes qui diffèrent l'une de l'autre par la phase d'alternance entre simples et doubles liaisons. La quasiparticule générée ici est un **soliton**. Comme l'énergie est la même des deux cotés du défaut, un soliton peut se propager librement le long de la chaîne du polymère. La présence d'un soliton induit l'apparition d'un état électronique localisé au milieu de la bande interdite (Figure I.7) [26]. Si deux solitons se trouvent sur la même chaîne conjuguée, ils n'entrent pas en interaction et restent donc indépendants.



Figure I.7 : Description des défauts chargés dans le cas d'un système dégénéré (exemple du polyacétylène).

La plupart des polymères conjugués ont un état fondamental non dégénéré. Dans ce cas, un défaut dans l'alternance des liaisons qui se manifesterait par la permutation des liaisons simples et double, modifierait alors l'énergie de la chaîne de polymère. Le défaut ainsi fabriqué s'appelle ion-radical pour le chimiste, **polaron** (quasi-particule) pour le physicien. L'ionisation d'un système conjugué provoque l'apparition de niveaux d'énergie localisés : un niveau de la HOMO passe dans la bande interdite et un niveau de la LUMO descend dans la bande interdite (Figure I.8).

Si une deuxième charge de même nature est injectée sur la même chaîne conjuguée, deux situations peuvent se présenter, un polaron supplémentaire peut naître sur un autre segment ou former une nouvelle espèce de charge double et sans spin que l'on appelle le bipolaron. Le polaron et bipolaron sont apte à se propager le long de la chaîne conjuguée (contribution intrachaîne à la conduction) ou de chaîne à chaîne (contribution inter-chaîne à la conduction) sous l'effet d'un champ électrique.



Figure I.8 : Description des défauts chargés dans le cas d'un système non dégénéré (a) Partie d'une chaîne de polythiophène neutre (forme aromatique et structure de bande associée), (b) représentations schématiques d'un polaron, (c) et d'un bipolaron.

I.6 Transport des charges

L'étude des phénomènes de transport dans les semi conducteurs organiques est toujours une source de travaux importants. En effet, il n'existe pas de théories générales qui décrive le transport de charge dans les semi conducteurs organiques, diverses études ont permis de dégager un certain nombre de phénomènes participant à la conduction électrique. De fait, le transport de charges dans les matériaux organiques est un phénomène très complexe. Leur comportement peut varier drastiquement suivant de nombreux paramètres physiques comme la température, la densité de porteurs, l'intensité du champ électrique, la distribution en énergie des porteurs, etc. De plus, des facteurs expérimentaux viennent compliquer la donne : présence de sites pièges pour les porteurs, inhomogénéité des matériaux, ...

Dans les semi-conducteurs en général, le transport des charges est décrit par leur mobilité μ , qui est la vitesse moyenne d'une charge par unité de champ électrique. Dans les matériaux moléculaires, la mobilité est limitée par les sauts entre les unités conjuguées, Les mobilités les plus grandes à température ambiante, de l'ordre de 20-35 cm².V⁻¹.s⁻¹ [27], ont été observées dans des monocristaux organiques, ce qui reste sensiblement inférieur à la mobilité du silicium (~1000 cm².V⁻¹.s⁻¹). Certains avaient été à l'origine développés pour le silicium

amorphe, tandis que des publications plus récentes présentent des modèles basés sur des observations expérimentales (dépendance de la mobilité avec la température, le champ électrique, ...) [28, 29].

Il existe plusieurs façons d'accéder expérimentalement à la mobilité des porteurs dans les matériaux organiques. Une première méthode est la mesure dite de temps de vol (TOF pour *Time Of Flight*) [30]. Le principe est l'envoi de d'impulsions laser sur un film de matériau puis la collection des charges produites par des électrodes. Le temps de traversée de la structure permet alors l'évaluation de la vitesse des porteurs. Une autre méthode se fait par la réalisation et la caractérisation de transistors à effet de champ (OFET pour *Organic Field Effect Transitor*) [31, 32].

Les films organiques peuvent être monocristallins, polycristallins ou amorphes. Les mobilités les plus importantes sont mesurées dans les monocristaux, les joints de grains limitant la conduction dans le cas de matériaux polycristallins et le désordre étant très important dans les SCO amorphes. La plupart des polymères sont amorphes. Les petites molécules peuvent donner des films polycristallins ou monocristallins. La Figure I.9 montre les mécanismes de transport de charge selon le type de matériau et la cristallinité.

Le mécanisme de transport exact dans ces matériaux reste encore largement inconnu. Cependant plusieurs modèles de transport ont été proposés. Parmi ces modèles on retrouve :

- le transport par bande (band transport)
- le transport par saut (variable range hopping, VRH) [33]
- > le transport par piégeage-dépiégeage (Multiple Trapping and Release, MTR) [34]
- le modèle du désordre gaussien (Gausian Disorder Model, GDM) [35]
- Charging Energy Limited Tunnelling (CELT) [36]
- le modèle de l'activation d'énergie (Activation Energy Model) [37]

Ces modèles sont applicables selon la nature du matériau : amorphe, monocristallin ou polycristallin [38]. Nous allons voir dans les sections suivantes plus en détail les quatre premiers types de transport cités.



Figure I.9 : Mécanismes de transport de charge dans un semi conducteur organique, selon le degré de désordre et de la structure de bande correspondante.

I.6.1 Transport par bande

Le modèle des bandes est approximatif et permet d'appréhender de manière qualitative les phénomènes dans les matériaux organiques. Dans ce modèle, les interactions intermoléculaires conduisent à la création de bande d'énergie pour les électrons et les trous. C'est un modèle applicable au matériau monocristallin. Contrairement aux semi-conducteurs inorganiques où les porteurs se déplacent librement dans une bande à travers des états délocalisés, les polarons dans les matériaux organiques, sont localisés sur la chaîne.

Dans le cas d'un cristal parfait, la dépendance en température de la mobilité suit une loi de puissance de ($\mu\alpha T^{-n}$). Ce type de loi prévoit donc une augmentation de la mobilité des porteurs lorsque la température diminue. C'est ce modèle qui a servi à expliquer les mesures de W. Warta et N. Karl en 1985 [39, 40] qui ont pu mesurer dans des monocristaux de naphtalène, des valeurs de mobilités de 100 cm².V⁻¹.s⁻¹ à des températures de quelques Kelvin (Figure I.10). Toujours pour de très basses températures, même comportement a été observé, des mobilités de l'ordre de 100 cm².V⁻¹.s⁻¹ [41] à été mesurées dans des cristaux de tetracène. Ce comportement suggère un transport des charges par bandes délocalisées comme dans le cas des semi conducteurs inorganiques. En effet, dans les semi conducteurs inorganiques, le transport des charges s'effectue à travers des états délocalisés et est limité par les vibrations du réseau (phonons) qui augmentent avec la température et provoquent la diffusion des porteurs.



Figure I.10 : Dépendance de la mobilité des électrons et des trous avec la température dans un monocristal de naphtalène mesurée par la technique de temps de vol. La dépendance de la mobilité suivant une loi de puissance ($\mu \alpha T^n$) est représentée par les lignes [39].

Le facteur limitant dans le transport par bande est la diffusion des porteurs due aux vibrations thermiques du réseau. Comme le nombre de vibrations du réseau diminue en abaissant la température, la mobilité des porteurs de charges est plus importante quand les températures sont plus basses. La figure I.11, montre comment les vibrations du réseau viennent perturber le transport des porteurs de charges dans le cas d'un transport par bande, par opposition au transport par sauts ou 'hopping'.



Figure I.11 : Mécanismes de transport de charges dans les solides. (a) Transport par bande, (b) transport par saut.

Dans un cristal parfait (Transport par bande) décrit par une ligne droite, le porteur libre est délocalisé. Ce sont les vibrations du réseau qui vont perturber la symétrie du cristal, diffuser les porteurs, et ainsi limiter la mobilité. Pour le transport par saut (hopping) cette fois le porteur est localisé et les vibrations du réseau sont essentielles pour qu'il se déplace d'un site à un autre.

I.6.2 Transport par saut « Hopping »

Le modèle précédent décrivait une mobilité qui augmentait à basse température dans un cristal parfait mais ces considérations ne sont plus exploitables d'une part à température plus élevée et d'autre part dans d'autres systèmes comme les matériaux polycristallins. Dans les matériaux organiques, la présence de défauts cristallins ou bien une structure noncristalline par exemple, conduit à une localisation des porteurs de charges au sein de la molécule. La conduction se fait alors par sauts d'un état à un autre et la différence d'énergie entre les états entraine une émission ou une absorption de phonons lors de transitions intra ou inter-chaines.

Tous les modèles de transport par sauts utilisés pour les matériaux organiques conducteurs s'appuient sur le taux de transition entre deux états localisés i et j étudiés par Miller et Abrahams [42] dont l'expression générale est :

$$\Gamma_{ij} = \Gamma_0 t_{ij}^2 \exp\left(-\frac{\Delta_{ij}}{k_B T}\right)$$
(I.1)

 Γ_0 est une constante indépendante de la température, k_B est la constante de Boltzmann, t_{ij} une énergie de transfert électronique et Δ_{ij} l'énergie d'activation du processus de saut.

La faible mobilité des porteurs de charges dans les matériaux organiques extraite des premiers OFET, renforçait donc l'idée selon laquelle le mécanisme de transport de charges était le hopping. Dans un second temps, des travaux ont contesté cette hypothèse. En effet ces derniers ont montré, dans le cas du semi-conducteur organique sexithiophène, qu'à partir d'une taille de grains supérieure à 20 nm, la mobilité devenait indépendante de la température (Figure I.12) [43].

A haute température (T > 100 K), la mobilité est activée thermiquement avec une énergie de 0,1eV. Cette énergie passe à 5 meV lorsque les températures sont comprises entre 100 K et 25 K et devient indépendante de la température en dessous de 25 K.



Figure I.12 : Evolution de la mobilité en fonction de la température pour des transistors à base de sexithiophène pour différentes tensions de grille.

Un autre type de modèle de saut existe, c'est le VRH. Ce modèle de transport se rencontre dans les matériaux polycristallins et amorphes et a été proposé par Dr M. Vissenberg et Dr. M. Matters en 1998 pour décrire le comportement des OFETs à film mince [33, 44], ils considèrent que le transport se fait uniquement par mécanisme de hopping sans intégrer le piégeage des charges dans des états localisés à l'intérieur du gap. Ils utilisent le concept de variable-range hopping (VRH) : un porteur va, soit sauter sur une petite distance avec une grande énergie d'activation, soit sauter sur une longue distance avec une faible énergie d'activation.

Ce modèle permet de prédire la dépendance de la mobilité en fonction de la tension de grille. En effet, lorsque la tension de grille augmente, le nombre de charges accumulées près de l'interface avec l'isolant de grille croit. Les charges accumulées remplissent les états localisés le plus profondément dans le gap (faible énergie), toute nouvelle charge vient occuper des états ayant des niveaux d'énergie plus importants. Ces charges additionnelles vont donc, en moyenne, nécessiter de plus faibles énergies d'activation pour sauter sur un site voisin. Ce phénomène se traduit par une augmentation de la mobilité avec la tension de grille. Ce modèle est basé sur le saut dans une densité d'états (DOS) exponentielle et sur la théorie de la percolation.

$$g(E) = \frac{N_t}{K_B T_0} exp\left(\frac{E}{K_B T_0}\right)$$
(I.2)

où N_t est le nombre d'états par unité de volume, k_B la constante de Boltzmann et T_0 la température.

I.6.3 Transport par piégeage et dépiégeage multiple (MTR)

Ce modèle, dit MTR (Multiple trapping and Release) a d'abord été développé dans la cadre des transistors à base de silicium amorphe [45] avant d'être appliqué au transport des charges dans les matériaux organiques par Dr. G. Horowitz, en 1995 [34]. Le modèle MTR considère que le transport de charges s'effectue dans des bandes, mais que la plupart des porteurs de charges injectés depuis les électrodes de source et de drain sont piégés dans des états localisés dans la bande interdite. La densité des pièges dans les semi-conducteurs cristallins est généralement faible comparée à la concentration de porteurs et les effets de piégeage ont un effet négligeable sur la mobilité des porteurs. Ces pièges provenant souvent des joints de grains, des impuretés dans le semi conducteur organique ou des défauts structuraux et d'interfaces.

La figure I.13 illustre ce mécanisme, les charges sont alors piégées pendant le transport dans les états étendus et sont libérées thermiquement après un certain temps. La durée de piégeage dépend de la profondeur énergétique du piège ainsi que de la température. C'est pour cette raison que ce modèle est décrit comme une succession de transport, de piégeage et de dépiégeage. Dans ce modèle, le transport des charges s'effectue par bandes délocalisées. Néanmoins, des états localisés dans la bande interdite dus à des impuretés ou à des défauts de structure limitent ce transport.



Figure I.13 : Schéma montrant le principe du transport de charge par piégeages et dépiégeages multiples. A gauche, avec un niveau de piège discret ; à droite, avec une distribution de pièges.

Ce modèle a été exploité pour expliquer la dépendance en température et en fonction de la tension de grille de la mobilité [43]. Jusque là, le modèle était applicable pour des films constitués de petits grains dont la distribution des pièges (joints de grain) était homogène. Cependant lorsque la taille des grains devient grande, la mobilité n'est plus thermiquement

activée et devient constante lorsque la température diminue. Il a fallu alors adapter le modèle en tenant compte de la morphologie du semi-conducteur [46]. Ainsi plus la taille des grains augmente, plus la mobilité des porteurs de charge augmente, ce qui a été confirmé par l'expérience (Figure I.14).



Figure I.14 : Variation de la mobilité avec la taille des grains dans un film d'octithiophene [46].

Le modèle s'applique à la fois aux matériaux amorphes et polycristallins et reste aussi utilisé pour décrire le transport des charges dans ces matériaux. Les deux modèles MTR (Multiple Trapping and Release) ou le comportement par saut (hopping) sont les deux modèles les plus reconnus pour décrire la dépendance de la mobilité avec la température et la tension de grille.

I.6.4 Transport par modèle du désordre gaussien (GDM)

Dans les matériaux organiques, la largeur des bandes HOMO et LUMO et plus de dix fois plus faible que dans le silicium amorphe. Ceci se traduit par un désordre énergétique et de position et une perte de la symétrie de translation à grand distance. Le concept de bandes d'énergie ne s'applique plus et la distribution des états accessibles (DOS) peut se décrire par une distribution gaussienne (Figure I.15).



Figure I.15: Densité d'état dans les bandes HOMO et LUMO d'un semi-conducteur organique. à gauche matériau ordonné, à droite désordonné (densité d'état gaussienne).
Le modèle du désordre Gaussien (GDM : Gaussian Disorder Model) suppose un transport par sauts intermoléculaire dans une densité d'états Gaussienne donnée par

$$g(E) = \frac{N_t}{\sqrt{2\pi}\sigma} exp\left(-\frac{E^2}{2\sigma^2}\right)$$
(I.3)

où N_0 est la densité totale des niveaux, l'énergie E est mesurée relativement au centre de la densité d'état (density of states, DOS), et σ décrit la largeur de la gaussienne.

Dans le modèle gaussien désordonné (GDM) le transport intervient par un processus de sauts entre états localisés, décrit par le formalisme de Miller et Abrahams :

$$\nu = \nu_0 \exp\left(-\frac{2R_{ij}}{\alpha}\right) \begin{cases} \exp\left(-\frac{E_j - E_i}{K_B T}\right) & \text{si } E_j > E_i \\ 1 & \text{si } E_j < E_i \end{cases}$$
(I.4)

où v_0 un facteur de proportionnalité, R_{ij} est la distance entre deux sites et E_i et E_j l'énergie respective du site de départ et du site d'arrivée. Le premier terme de l'équation I.4 représente la probabilité de passage par effet tunnel, le second terme tient compte de la densité de vibrations de réseau (phonons). Ce processus présente deux facteurs limitants : la distance séparant 2 sites et l'écart énergétique entre ces sites. La mobilité des porteurs est activée thermiquement. La figure I.16 montre le comportement de saut lié à l'équation (I.4).



Figure I.16 : Illustration du transport de saut à travers les états localisés dans le Modèle de désordre gaussien (GDM).

Au début, les sauts se font vers les états d'énergie plus basse. Lorsque la densité de ses états devient trop faible, le porteur de charge saute vers un état d'énergie voisine à l'énergie de transport. Le saut suivant se fait vers un état d'énergie plus basse, puis à nouveau vers un état à l'énergie de transport, et ainsi de suite.

I.7 Transistor organique à effet de champ

L'idée de réaliser des transistors organiques est née à la fin des années 80 [47]. Cette technologie est devenue rapidement très attractive dans le milieu industriel où le silicium et les semi conducteurs inorganiques ont toujours régné, les transistors élaborés à partir de polymères ou de petites molécules sont envisagés comme une alternative aux transistors inorganiques classiques pour certaines applications telles que les matrices actives d'écrans. Le transistor organique est plus connu sous l'acronyme anglais OTFT (Organic Thin Film Transistor) signifiant transistor organique à films minces ou encore OFET (Organic Field Effect Transistor) pour transistor organique à effet de champ.

Ces deux dernières décennies, les transistors à effet de champ organiques (OFET) ont connu un fort développement. Bien que les OFETs soient plus lents que leurs homologues inorganiques, ils offrent tout de même des performances intéressantes pour la réalisation de capteurs (chimique, biologique, de température, de pression [48]), de circuits intégrés [49], des badges d'identification électronique.

Un transistor (venant de "transfer resistor") est un interrupteur électronique dans lequel une résistance entre deux électrodes est contrôlée par un courant externe. Les transistors organiques (OFET) sont des MISFETs (Metal Isolant Semiconductor Field Effect Transistor) en couches minces assez similaires au MOSFET (Metal Oxyde Semiconducteur Field Effect Transistor) en silicium amorphe. Sa structure est bien adaptée aux matériaux à faible conductivité (Si amorphe) [50], c'est la raison pour laquelle on utilise classiquement pour les OTFTs le modèle de fonctionnement des MOSFET.

Ils se caractérisent aussi par une électrode de grille isolée du reste du dispositif. Cependant, la faible densité de porteurs des semi conducteurs organiques fait que les OFETs fonctionnent en accumulation et non en inversion. Le transport de charges a lieu dans les premières monocouches de la couche semi-conductrice, à l'interface avec le diélectrique de grille. Il n'y a donc pas de zone de charge d'espace qui se crée dans le substrat pour isoler le canal de conduction du substrat [51, 38].

Un OFET utiliser l'effet du champ électrique pour contrôler la densité de porteurs dans le dispositif et ainsi l'intensité du courant le traversant, Il est constitué d'un empilement de couches minces comme illustré dans la figure I.17.



Figure I.17 : Structure d'un transistor organique en films minces de type grille en bas et source/drain au dessus. a) vue de côté, b) vue de dessus.

I.8 Injection de porteurs de charges aux interfaces

A cause du faible dopage des semi conducteur organique, les porteurs de charge formant le canal de conduction sont injectés depuis les contacts. Pour améliorer les performances des transistors organiques, il est nécessaire d'avoir une bonne injection des charges entre les électrodes et le SCO [52, 53]. Ces charges doivent alors sauter ou traverser une barrière énergétique à l'interface électrode/SCO. De manière générale, cette barrière énergétique dépend de la position relative des niveaux HOMO et LUMO du matériau et des travaux d'extraction des électrodes correspondantes. Le travail d'extraction ou travail de sortie d'un métal Φ_m (en anglais *work function W_m*) correspond à l'énergie nécessaire pour arracher un électron du métal, i.e. l'écart énergétique entre son niveau de Fermi et le niveau du vide. Les niveaux électroniques du métal des électrodes de source et drain (niveau de Fermi E_F du métal et HOMO LUMO du semi-conducteur organique) sont choisis pour que les hauteurs de barrières énergétiques mise en jeu soient minimales et facilitent le transfert de charges. Pour un semi-conducteur organique, on peut également définir deux paramètres :

- Le potentiel d'ionisation (PI), c'est-à-dire l'énergie minimum nécessaire pour extraire un électron de la bande HOMO,
- L'affinité électronique (AE) ou énergie acquise par un électron capturé par la bande LUMO.

Ce concept est illustré par la figure I.18.



Figure I.18 : Niveaux d'énergies d'électrodes sources et du SCO avant contact : hauteur de la barrière d'injection de trous (E_{bp}) , d'électrons (E_{bn}) .

Le modèle classique de Mott-Schottky décrit une barrière énergétique à l'injection de porteurs : $E_{bp} = |$ PI- $\Phi_m |$ pour les trous, et $E_{bn} = |$ AE- $\Phi_m |$ pour les électrons [54].

Les hauteurs de barrière d'injection pour les électrons E_{bn} et pour les trous E_{bp} sont les paramètres clés pour savoir quel est le type des porteurs injectés (électrons ou trous). Ce sont en fait ces barrières qui déterminent le type, n ou p, d'un semi conducteur organique. Ainsi, on dira qu'un SCO est de type p si l'on peut y injecter plus facilement des trous que des électrons, ce qui est vrai si la barrière pour les trous est plus faible que la barrière pour les électrons ($E_{bp} < E_{bn}$).

Dans les matériaux organiques, des dipôles situés à l'interface métal/semi conducteur peuvent se créer et perturber le système entraînant un non alignement du niveau du vide [52]. Les charges ou les dipôles d'interface induisent une chute de potentiel Δ qui provoque un glissement des niveaux du semi conducteur.

Les barrières d'injection pour les porteurs de charges deviennent : $E_{bp} = |PI - \Phi_m - \Delta|$ pour les trous, et $E_{bn} = |AE - \Phi_m + \Delta|$ pour les électrons. La figure I.19 montre la hauteur de barrière d'interface or-pentacène, on observe un dipôle d'interface de 1 eV.



Figure I.19 : Hauteur de barrière réelle de l'interface or-pentacène [55].

Dans tout transistor, le caractère ohmique des contacts est essentiel pour que le courant circulant dans le canal ne soit uniquement influencé que par les propriétés du semi conducteur et non par celles des contacts. Un contact est dit ohmique lorsque l'électrode se comporte comme une source infinie de charges, ainsi, le courant n'est conditionné que par le volume du matériau [56]. Par exemple, un semi conducteur de type p peut former un contact ohmique avec un métal lorsque le travail de sortie du SCO (Φ_{scO}) est inférieur au travail de sortie du métal (Φ_m). C'est le cas de l'or ou de l'oxyde d'indium et d'étain (ITO).



Figure I.20 : Bandes d'énergie à l'interface métal/semi-conducteur organique : a) avant contact, b) selon le modèle de Mott-Schottky, (c) et avec des dipôles entraînants le non alignement des niveaux du vide à l'interface, Δ correspond à la différence d'énergie entre les niveaux.

La figure I.20 montre le diagramme de bandes d'une interface métal/SCO en suivant l'alignement du niveau du vide avant (Figure I.20a) et après contact. Deux types de contacts, un contact selon le modèle de Mott-Schottky et la présence d'un Dipôle inter-facial. Pour le modèle de Mott-Schottky (Figure I.20 (b)), a la mise en contact, les électrons du SC diffusent vers le métal jusqu'à égalisation des niveaux de Fermi. Une barrière de potentiel s'établit à l'interface SC/Métal pour un électron allant du SC vers le métal, elle empêche la diffusion des électrons du SC vers le métal. Le potentiel de diffusion V_{bi} (built-in voltage) correspond l'écart de tension dans la couche de charge d'espace est égal à la différence entre les travaux de sortie : $qV_{bi} = |\Phi_M - \Phi_{SCO}|$. Le diagramme de bande a l'interface métal/organique avec apparition d'un dipôle négatif a l'interface est illustré dans la figure I.20 (c), les processus physiques exacts à l'origine de la formation des dipôles d'interface sont encore mal compris.

Il faut choisir un métal avec un travail de sortie approprié selon le type de porteurs que l'on veut injecter.

- Tout métal, possède un niveau de Fermi proche de la bande HOMO d'un semi conducteur organique, peut accepter des électrons en provenance du semi conducteur, ce qui est équivalent à dire qu'il peut y injecter des trous.
- Tout métal, possède un niveau de Fermi proche de la bande LUMO d'un semi conducteur organique, peut y injecter des électrons.

Le niveau de Fermi du métal devra correspondre au niveau de la HOMO pour l'injection des trous et à la LUMO pour l'injection des électrons, comme le montre la figure I.21.



Figure I.21 : a) Diagramme idéal des niveaux d'énergie dans un transistor organique à $V_G = V_D = 0, b$) principe de fonctionnement en accumulation d'électrons, c) accumulation de trous, d) transport des électrons, e) transport des trous [57].

L'application d'une tension de grille V_G crée un champ électrique à travers l'isolant et induit une courbure des niveaux HOMO et LUMO. Pour un OFET de type N, l'application d'une tension V_G positive décale les niveaux HOMO et LUMO vers le bas, provoquant une accumulation d'électrons. En présence d'une tension V_D , les électrons pourront alors circuler et un courant I_D traversera le transistor. Ce concept est illustré par la figure I.21 (b) et (d). Un raisonnement symétrique s'applique pour une polarisation de grille négative (Figure I.21 (c) et (e)) pour un transistor de type P. Les niveaux HUMO et LUMO se décalent vers le haut, la HOMO interagit avec les niveaux de Fermi des contacts et des électrons sortent du semi-conducteur par les contacts, laissant des trous chargés positivement derrière eux. Ces trous sont alors des charges mobiles qui bougent en réponse à une tension appliquée au drain.

I.9 Principe de Fonctionnement d'un OFET

Le principe de l'OFET repose sur le fait qu'un courant circule entre les deux électrodes source et drain lorsqu'une tension est appliquée entre celles-ci. L'intensité du courant est modulée par la tension appliquée à l'électrode de grille.

Dans le cas d'un SCO de type p, si aucune tension n'est appliquée, le système peut être représenté par la figure I.22 (a) où le semi conducteur organique est toujours plus ou moins dopé de façon involontaire par l'environnement qui l'entoure (oxygène, humidité...). Sur cette figure, les charges résiduelles existantes sont représentées dans la couche semi conductrice.

Lorsqu'une tension négative est appliquée sur la grille ($V_{GS} < 0$), on va accumuler un canal de charges positives (trous) de manière homogène à l'interface entre le semi conducteur organique et l'isolant. C'est le régime d'accumulation qui correspond au régime de fonctionnement des OFET (figure I.22 c). La densité de porteurs de charges varie en fonction du potentiel V_{GS} appliqué. Un canal conducteur s'établit entre la source S et le drain D. Afin de créer un courant drain I_{DS} , une tension V_{DS} doit être appliquée entre S et D de telle sorte que $|V_{DS}| \ll |V_{GS}|$. Pour les faibles valeurs de V_{DS} , le courant croit linéairement avec V_{DS} , c'est le régime linéaire. Au contraire si l'on applique une tension positive sur la grille les trous sont repoussés de l'interface isolant / semi-conducteurs (figure I.22 b).

Si on continue à croître le potentiel de drain V_{DS} , la différence de potentiel entre V_S et V_D crée une répartition de potentiels variables entre ces deux électrodes et la densité de charges n'est plus homogène dans tout le canal (diminue depuis la source jusqu'au drain (figure I.22 d). Lorsque ($|V_{DS}| > |V_{GS}|$), une zone de déplétion se crée à proximité du drain et le courant n'augmente plus linéairement mais tend vers une asymptote, $I_{DS,sat}$ courant de saturation. On se trouve alors dans le régime de saturation du transistor (figure I.22 e).



Figure I.22 : a) Représentation du fonctionnement d'un transistor organique de type p sans aucune polarisation, + symbolise un trou et – un électron, b) représentation du mode de déplétion $(V_G > 0), c)$ représentation du mode d'accumulation $(V_G < 0), d)$ régime linéaire, $(|V_D| < |V_G|), e)$ régime saturé $(|V_D| > |V_G|)$ (adaptée de [58]).

Le transistor organique fonctionne en accumulation, et non pas en inversion. Il s'agit là d'une différence majeure entre les transistors à effet de champ organique et inorganique. Le canal conducteur se forme par une couche d'inversion de porteurs minoritaires comparé au canal de l'OFET qui se forme par accumulation des porteurs majoritaires. Pour cela, la tension de grille V_G arrache des porteurs pour alimenter le canal. Le transport de charges a lieu dans les premières monocouches de la couche semi-conductrice, à l'interface avec le diélectrique de grille [43]. Il n'y a donc pas de zone de charge d'espace qui se crée dans le substrat pour isoler le canal de conduction du substrat. Une autre différence concerne la zone du canal lorsque la grille n'est pas polarisée. Le transistor à film mince peut avoir quelques porteurs résiduels qui donnent lieu à un courant de fuite contrairement au MOSFET où les zones de drain et de source sont appauvries grâce aux jonctions p-n entre elles et le substrat.

I.10 Géométries des OFETs

Le transistor organique à effet de champ, étant un transistor en couches minces, va pouvoir présenter plusieurs configurations selon l'ordre dans lequel ces couches vont être déposées. Ainsi, on peut distinguer deux grandes familles d'architecture : les OFETs avec la grille déposée en premier dit grille basse (Bottom Gate, BG) et les OFETs avec la grille déposée en dernier dit grille haute (Top Gate, TG).



Figure I.23 : Représentation schématique des quatre configurations possibles des OFETs.

La structure BG, c'est une configuration habituelle pour laquelle l'électrode de grille est déposée directement sur le substrat suivi du dépôt de diélectrique sur la grille, dans laquelle la grille est commune à tous les composants, n'est pas souhaitable pour l'intégration aux circuits. Dans la configuration TG l'isolant de grille et le métal de grille sont déposés en dernier lors de l'élaboration du transistor. Ce type de configuration permet l'étude de semi conducteurs non stables à l'air, le diélectrique protégeant la couche active de l'oxygène et de l'eau présents dans l'air.

Les configurations TG et BG sont constitués de deux structures en fonction de la position des contacts source et drain par rapport au semi conducteur, contact haut (Top Contact, TC) et contact bas (Bottom Contact, BC). La figure I.23 montre les quatre architectures de base utilisant un empilement « classique » des différentes couches du transistor.

D'un point de vue des performances de transistors, ces différentes architectures ne seront pas équivalentes. Chaque géométrie possède ses avantages et ses inconvénients en fonction des matériaux, des technologies de dépôt utilisées et des propriétés finales de transistor.

Quelque soit l'architecture retenue, comme le semi-conducteur est potentiellement sensible à toute pollution, La géométrie TG présente l'avantage d'encapsuler le semi conducteur organique. Quelques types de diélectriques (PMMA, Ta_2O_5) ont été utilisés pour réaliser des TG-OFETs [59, 60], aussi, le diélectrique protégeant la couche active de l'oxygène et de l'eau présents dans l'air. Le diélectrique est directement déposé sur le semi conducteur organique, le semi conducteur étant la couche assurant le transport des charges et le canal de conduction se situe à l'interface entre le semi conducteur et le diélectrique, celle-ci ne doit pas non plus être détériorée par des hautes températures lors du dépôt du diélectrique. Les TG ont une durée de vie plus longue que les BG car le diélectrique qui sert d'isolant, encapsule en même temps le semi-conducteur organique et par conséquent on note un vieillissement moins rapide [61].

En ce qui concerne les contacts, la position des contacts est aussi un paramètre influant sur le mode de fabrication ainsi que sur les performances des OFETs. La structure BC est généralement la plus pratique à mettre en œuvre, des mobilités plus faibles ainsi que des résistances de contact importantes ont été observées dans ce type de structure. Ces baisses de performances sont dues à une rupture de la continuité structurelle du semi conducteur à son interface avec l'électrode, une forte densité de pièges due à la présence de grains de petite taille à cet endroit (Figure I.24 a et b) explique une mobilité réduite [62].



Figure I.24 : Images (a) MEB et (b) AFM de la morphologie du pentacène près du bord d'une électrode source ou drain [63]. Microscopie Force Atomique (AFM), microscopie électronique à balayage (MEB).

Dans le cas d'une configuration en top contact les électrodes sont déposées par évaporation sous vide à travers un masque mécanique. Cette dernière méthode limite la possibilité de réduire la longueur de canal constitué par la distance entre le drain et la source. Les structures TC présenteraient une plus grande surface de contact pour injecter les charges. En configuration TC, les mobilités à effet de champ sont souvent plus importantes, et leurs caractéristiques de sorties ne montrent pas de non linéarités au voisinage des faibles tensions drain-source contrairement aux BC [64]. Ces différences peuvent s'expliquer d'une part par les résistances de contact plus faibles pour les transistors TC.

D'autres dénominations sont possibles. Ainsi, on parlera de configuration coplanaire (Figure I.23 (a) TGTC, (d) BGBC) pour des transistors où les contacts seront dans le même plan que l'interface isolant-semi-conducteur. Dans la configuration inverse, on parlera de structure décalée (« staggered » en anglais) (Figure I.23 (b) TGBC, (c) BGTC).

Comme on peut le voir, chaque architecture présente des avantages et des inconvénients. Le choix d'une configuration par rapport à une autre se fera donc principalement en fonction des choix technologiques associés à la réalisation du transistor.

I.11 Caractéristiques électriques d'un OFET

Les caractéristiques électriques I-V des transistors organiques sont modélisables de manière semblable à celles des transistors à effet de champ conventionnels [65]. Un transistor est en général caractérisé par deux types de caractéristiques : les courbes de sortie, et les courbes de transfert.

I.11.1 Caractéristique de sortie

La première caractéristique permettant de visualiser le fonctionnement d'un transistor à effet de champ consiste à tracer son courant de drain I_{DS} en fonction de la tension de drain V_{DS} ($I_{DS} = f(V_{DS})$) pour différentes tensions de grille (V_{GS}). La figure I.25 montre un exemple de caractéristique de sortie d'un transistor à canal de type p.



Figure I.25 : Caractéristiques de sortie d'un OFET à couche active de pentacène réalisés sur SiO_2 (W= 10 mm,L= 20µm) [66].

On peut observer que pour chaque tension de grille appliquée, trois régimes se distinguent pour l'état passant du transistor. Pour les faibles valeurs de V_{DS} , le courant croit linéairement avec V_{DS} , c'est le régime linéaire. Quand la tension V_{DS} augmente au-delà du régime linéaire, la densité de porteurs libres décroît au voisinage du drain, et le courant de drain présent une variation sous-linéaire, le courant n'évolue plus linéairement et la courbe forme un « coude », le régime est dit sous-linéaire. Lorsque V_{DS} devient de plus en plus négative, la densité de porteurs devient nulle côté drain et le courant I_{DS} est indépendant de la tension V_{DS} et n'évolue plus. On se trouve alors dans le régime de saturation du transistor.

I.11.2 Caractéristique de transfert

Cette courbe permet de suivre l'évolution du courant I_{DS} en fonction de la tension V_{GS} ($I_{DS} = f(V_{GS})$) pour une polarisation de drain V_{DS} constante (Figure I.26). Ainsi, les caractéristiques de transfert présentent en général, une courbe mesurée en régime linéaire et une courbe mesurée en régime de saturation. A partir de ces caractéristiques, différents paramètres clés du fonctionnement du transistor peuvent être obtenus comme la valeur de la mobilité FET μ_{FET} des porteurs de charges en régime linéaire et saturé, la tension seuil V_T , le rapport I_{on}/I_{off} , la pente sous le seuil *SS*.



Figure I.26 : Caractéristiques de transfert d'un OFET en Pentacène [66].

Les caractéristiques de transfert sont en général présentées sous forme logarithmique et sous forme linéaire. On utilisera l'une ou l'autre de ces formes en fonction des paramètres du transistor que l'on veut extraire. Pour un transistor à canal p, lorsque la polarisation de grille est fortement positive, le transistor est bloqué, le canal est complètement déplété. Par conséquent, un très faible courant circule entre la source et le drain. Ce courant est appelé courant off, I_{off} . Ce courant est quasiment constant jusqu' une certaine valeur de V_{GS} à partir de laquelle les charges commencent à s'accumuler dans le canal.

I.12 Extraction des paramètres

La mise en équation du fonctionnement du transistor organique nécessite la prise en compte de certaines hypothèses issues des modèles de fonctionnement des transistors inorganiques :

- Les électrodes source et drain forment des contacts ohmiques idéaux avec le semi conducteur organique (pas de résistance de contact ou de barrière à l'injection),
- > Le semi-conducteur n'est pas dopé et ne présente pas de sites pièges,

La mobilité des porteurs est constante dans tout le canal et indépendante de V_G et V_D ou de la température.

A noter, dans la réalité, peu voir aucune de ces hypothèses n'est vérifiée. Le contact entre les électrodes (source et drain) et le semi conducteur n'est jamais parfait. Des résistances de contact ou une barrière de potentiel peuvent limiter l'injection des charges dans le semi conducteur. La mobilité va varier en fonction de la densité de porteurs dans le canal, la distance à laquelle on se trouve de l'interface entre le semi conducteur et le diélectrique, la longueur du canal, la polarisation appliquée sur la grille. C'est pour cette raison que l'extraction des paramètres d'étude des transistors n'est pas triviale et a fait l'objet de nombreuses études [67-69].

I.12.1 Mobilité

La mobilité décrit la facilité qu'ont les porteurs de charges à se déplacer à l'intérieur de la couche active, sous l'influence d'un champ électrique. Elle apparait comme un facteur amplifiant le courant de drain et est directement liée à la vitesse de commutation des circuits. Elle est aussi dépendante du degré de cristallinité du semi conducteur organique. Le PPV (polymère) par exemple a une mobilité de l'ordre de 10^{-4} cm² V⁻¹s⁻¹ et le pentacène (petite molécule) exhibe une mobilité supérieure : $1.5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}\text{s}^{-1}$. Cette dernière est équivalente à celle dans le silicium amorphe mais reste loin des valeurs atteintes dans le silicium polycristallin : 50-100 cm² V⁻¹s⁻¹ ou le silicium monocristallin 300-900 cm² V⁻¹s⁻¹ [70].

La figure I.27 montre l'évolution avec le temps des mobilités obtenues pour un certain nombre de matériaux organiques. Ce graphique illustre la lente maturation de la technologie des dispositifs électroniques à base de matériaux organiques.



Figure I.27 : Evolutions de la mobilité des trous des semi conducteurs organiques au cours des ans [71].

On considère la densité de charges mobiles par unité de surface induites à une position x dans le canal, $Q_{ind}(x)$ (C/cm²) :

$$Q_{ind}(x) = N(x). q. t = C_i (V_{GS} - V(x))$$
(I.5)

où N(x) est la concentration de charges dans le canal à la position x (cm⁻³), q la charge élémentaire, t l'épaisseur du canal formé par les charges et C_i la capacité de l'isolant (F/cm²). Les premiers porteurs de charges ne sont pas introduits dans le canal à V_{GS} = 0. Pour un SCO à canal p, un transfert de charge entre le métal et le SCO résulte d'une disparité entre le niveau de Fermi du métal et la HOMO, formant un dipôle et une courbure de bande dans le SCO.

S'il y a un nombre important de pièges profonds pour les trous dans le film de SCO (suffisamment profonds pour rendre les trous piégés à l'intérieur effectivement immobiles), ceux-ci doivent être remplis avant que le canal conduise effectivement. Par conséquent, si un courant plus important circule entre la source et le drain lorsque le transistor est dans son état bloquant (V_{GS} = 0), c'est que des charges résiduelles circulent (le canal est dopé de manière non intentionnelle), alors dans toutes ces situations, il est pratique de définir une tension de seuil, V_T , nécessaire pour introduire des charges mobiles.

En prenant en compte la tension de seuil V_T, la densité de charges devient :

$$Q_{ind}(x) = C_i (V_{GS} - V_T - V(x))$$
(I.6)

Au point x, il faut en outre prendre en compte le décalage de potentiel dû à l'application de la tension de drain. La charge capacitive induite dans la bande de largeur dx s'écrit donc :

$$dq = C_i W (V_{GS} - V_T - V(x)) dx \tag{I.7}$$

où W est la largeur du canal (μ m).

Le courant I_{DS} qui circule entre la source et le drain correspond au déplacement de cette charge élémentaire pendant le temps dt :

$$I_{DS} = \frac{dq}{dt} = \frac{dq}{dx}\frac{dx}{dt}$$
(I.8)

La mobilité μ est définie comme le rapport entre la vitesse moyenne des porteurs de charge $\upsilon = dx/dt$ et le champ électrique E = dV/dx, ce qui peut s'écrire : $dx/dt = \mu dV/dx$. En utilisant l'equation (I.7), on peut donc écrire l'equation (I.8) sous la forme :

$$I_{DS} dx = W \mu C_i (V_{GS} - V_T - V(x)) dV$$
(I.9)

Si on intègre maintenant cette équation sur toute la longueur du canal, c'est-à-dire entre la source (x=0) et le drain (x=L), en tenant compte de l'hypothèse selon laquelle la mobilité ne varie pas le long du canal, on obtient :

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_i \left[(V_{GS} - V_T) V_{DS} - \frac{V_{DS}^2}{2} \right]$$
(I.10)

Dans le régime linéaire, la tension est assez faible ($|V_{DS}| << |V_{GS} - V_T|$), par conséquent le terme $\frac{V_{DS}^2}{2}$ devient négligeable. Ainsi l'équation (I.10) devient :

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu_{lin} C_i (V_{GS} - V_T) V_{DS}$$
(I.11)

On peut déduire la transconductance (g_m) qui va permettre le calcul de la mobilité dont la définition est :

$$g_m = \left(\frac{\partial I_{DS}}{\partial V_{GS}}\right)_{V_{DS}} = \frac{WC_i\mu_{lin}V_{DS}}{L}$$
(I.12)

La mobilité en régime linéaire est égale à :

$$\mu_{lin} = g_m \frac{L}{W C_i V_{DS}} \tag{I.13}$$

En régime linéaire, pour déterminer la mobilité, il suffit simplement de tracer le graphe $I_{DS}(V_{GS})$ (Figure I.28) puis de calculer la pente de la partie linéaire de cette courbe (g_m)



Figure I.28 : Détermination de la mobilité (μ) et de la tension de seuil (V_T) en régime linéaire sur une courbe de transfert d'un transistor organique à canal p.

Dans le régime de saturation, $|V_{DS}| \ge |V_{GS} - V_T|$, le canal est pincé. La différence de potentiel dans le canal reste constante quelle que soit la polarisation appliquée sur le drain et a la valeur

de $|V_{DS,sat}| = |V_{GS} - V_T|$. Le courant de saturation s'obtient simplement en remplaçant V_{DS} par $V_{GS} - V_T$ dans l'équation (I.10), ce qui donne :

$$I_{DS} = \frac{W}{2L} \mu_{sat} C_i (V_{GS} - V_T)^2$$
(I.14)

En régime de saturation, la mobilité peut être déterminée par la pente de la courbe $\sqrt{|I_{DS}|} = f(V_{GS})$

$$\mu_{sat} = \frac{2L}{WC_i} \left(\frac{\partial \sqrt{|I_{DS}|}}{\partial V_{GS}} \right)_{V_{DS}}^2$$
(I.15)



Figure I.29 : Détermination de la mobilité (μ) et de la tension de seuil (V_T) en régime de saturation sur une courbe $\sqrt{|I_{DS}|} = f(V_{GS})$ d'un transistor organique à canal p : a) échelle linéaire et (b) logarithmique.

Pour la même valeur théorique, des différences entre les deux mesures de la mobilité peuvent être observées. De par sa dépendance avec la tension de grille, il semble plus significatif physiquement de choisir la mobilité dans le régime linéaire. De fait, pour une tension de drain la plus faible possible, la mobilité est considérée comme quasi-constante sur toute la longueur du canal.

I.12.2 Tension de seuil

La tension de seuil V_T peut être définie comme étant la tension de grille à partir de laquelle le canal de conduction commence à se former. Dans le but d'intégrer les transistors à des circuits fonctionnant à faible tension, la tension seuil $|V_T|$ doit être la plus faible et la plus stable possible.

La définition de la tension de seuil dans le cas d'un MOSFET classique est la tension existant entre la source et la grille à partir de laquelle un canal d'inversion de charges se crée [65]. Cependant dans les transistors organiques cette définition n'est pas valable car ces composants ne fonctionnent pas en inversion mais en déplétion et en accumulation d'accumulation avec des mécanismes de transport différents, donc la définition de la tension V_T suscite quelques interrogations sur sa validité scientifique [72]. De fait, dans ce modèle V_T devrait être nulle, pour un transistor à canal p, l'accumulation commence dès que la polarisation de la grille passe des valeurs positives aux valeurs négatives, donc à ce que la tension de seuil soit nulle.

Cette valeur est toujours différente de zéro, dans la réalité, plusieurs éléments vont contribuer à l'établissement d'une tension seuil. On peut citer par exemple, la présence d'impuretés qui vont doper involontairement le semi-conducteur. La tension de seuil étant directement liée au taux de dopage, N (cm⁻³) par la relation (I.16).

$$V_T = \frac{Nqt}{C_i} \tag{I.16}$$

Où q est la charge élémentaire, N la densité de porteurs majoritaires, t l'épaisseur du SCO et C_i la capacité de l'isolant.

Une seconde contribution à V_T a pour origine le non alignement des niveaux d'énergie de chaque coté de la couche isolante. Cela inclut les différences de travail de sortie de chaque coté de la couche isolante (Φ_m , Φ_{SCO}), et la présence possibles de charges d'interfaces (Q_i). Cette contribution est appelée le potentiel de bande plate V_{FB} .

$$V_{FB} = \frac{\phi_m - \phi_{SCO}}{q} - \frac{Q_i}{C_i}$$
(I.17)

La dernière contribution provient des pièges présents dans le SCO ou à l'interface entre le SCO et l'isolant. La formule de V_T suppose que les porteurs soient libres. Cependant, le transport est limité par les pièges présents dans la bande interdite. Il faut alors que la densité de porteurs de charges accumulés soit suffisante pour que ces pièges se remplissent et que la mobilité augmente. Dans ces conditions, Meijer et al. [73] suggère d'utiliser un paramètre plus significatif : la tension « switch-on », V_{Son}. Ce potentiel est défini comme le potentiel de bandes plates. Quand $V_{GS} < V_{SO}$, I_{DS} reste constante, et pour $V_{GS} = V_{SO}$ I_{DS} commence à croître. C'est donc la tension à partir de laquelle le courant de drain commence à augmenter dans les courbes de transfert sous forme logarithmique (Figure I.29(b)). La présence de pièges à l'interface semi conducteur/diélectrique conduit à un décalage de la tension seuil V_T soit vers les tensions négatives (type p) soit vers les tensions positives (type n).

A partir des caractéristiques électriques de transfert, la tension de seuil peut être extraite par deux méthodes :

En régime de saturation : la plus couramment répandue consiste à déterminer la valeur de l'intersection de la droite issue de la partie linéaire de la courbe $\sqrt{|I_{DS}|}$ en fonction de V_{GS} avec l'axe des abscisses (Figure I.29(a)).

En régime linéaire : méthode de la dérivée seconde, initialement proposée pour les transistors MOSFETs puis récemment appliquée aux OFETs [74]. Plus rigoureuse, elle tient compte de la dépendance de la mobilité avec la tension de grille et de la résistance des contacts. Avec cette méthode la tension de seuil correspond à la tension pour laquelle la courbe de la dérivée seconde du courant $\frac{\partial^2 I_{DS}}{\partial^2 V_{GS}}$ (à V_{DS} constante en régime linéaire) présente un maximum.

I.12.3 Rapport I_{On}/I_{Off}

Le rapport I_{On}/I_{Off} est le paramètre crucial du transistor, il correspond au rapport des courants lorsque la tension de grille commute entre l'état On et l'état Off. On le détermine en mesurant le courant maximum (I_{on}) et le courant minimum (I_{Off}) sur la courbe de transfert en échelle logarithmique (Figure I.29 (b)). La conductivité dans l'état Off est fortement dépendante de la quantité résiduelle de dopant, qui crée des porteurs de charges dans le SCO. Ces porteurs de charges, indépendant de la tension de polarisation V_{GS} sont donc indésirables car ils créent une conductivité à l'état Off. Le courant on va, lui, dépendre de la mobilité des porteurs et donc de la quantité de porteurs présents dans le canal. Ce rapport caractérise la capacité d'un dispositif à passer d'un signal On (1) à un signal Off (0) et il est nécessaire pour certaines applications, notamment dans la réalisation de circuits logiques, que ce rapport soit supérieur à 10⁶ [75]. Ainsi un bon rapport I_{on}/I_{off} va être déterminant pour avoir des niveaux 0 et 1 bien distincts.

La maximisation du rapport I_{on}/I_{off} est donc recherchée à la fois avec un I_{on} élevé et un I_{off} le plus faible possible. Pour augmenter I_{on} , il est possible de jouer sur la géométrie du transistor. En effet, comme le montre l'équation (I.14), le courant I_{DS} à saturation est proportionnel au rapport W/L. Ainsi, en augmentant la largeur du canal et en diminuant sa longueur, on peut obtenir de plus grands rapports I_{On}/I_{Off} [76]. Cependant, les dispositifs dont la longueur de canal est petite (<10-15µm) subissent les effets de canal court [77]. Pour

diminuer I_{off} il suffit de purifier les matériaux organiques avant le dépôt pour éliminer des impuretés et donc de réduire la diffusion des porteurs [78] quand aucune tension de grille n'est appliquée.

I.12.4 Pente sous le seuil S

La pente sous le seuil indique la vitesse à laquelle le transistor passe de l'état passant à l'état bloquant. Comme pour le rapport I_{on}/I_{off} , la pente sous le seuil est extraite à partir de la caractéristique de transfert en échelle logarithmique (Figure I.30). Elle s'exprime en *V/decade* et représente la variation du potentiel de grille nécessaire pour augmenter le courant de drain d'une décade. Définie ainsi, elle est l'inverse de la pente, au sens mathématique, de la droite $Log(I_{DS}) = f(V_{GS})$.

$$S = \frac{dV_G}{dlog_{10}(I_D)} = \frac{K_B T}{q} \ln(10) \left(1 + \frac{C_d + C_{int}}{C_i}\right)$$
(I.18)

où k_B représente la constante Boltzmann, T la température, C_{int} la capacité équivalente à la densité d'états d'interfaces ($C_{int} = qN_{int}$ avec N_{int} la densité d'états d'interfaces) entre le semi conducteur et le diélectrique, C_i celle de l'isolant et C_d la capacité de déplétion dont la valeur dépend de la densité de pièges dans le volume. Il apparaît dans l'équation (I.18) que la pente sous le seuil est fortement liée aux défauts dans le semi-conducteur et à l'interface entre le semi conducteur et l'isolant. Ainsi une pente sous le seuil élevée sera l'indication d'un nombre de pièges important [79].

$$S = \frac{K_B T}{q} \ln(10) \left[1 + \frac{q}{C_i} \left(\sqrt{\varepsilon_{sc} N_{bulk}} + q N_{int} \right) \right]$$
(I.19)

L'équation (I.19) montre les contributions des défauts volumiques et d'interfaces sur la pente sous le seuil, où N_{bulk} est la densité d'états dans le volume du semi conducteur et ε_{sc} sa constante diélectrique.

Bien que les OFET fonctionnent en accumulation, une importante densité de pièges d'interface conduit de la même manière à une augmentation de S. Ce paramètre renseigne donc sur la qualité de l'interface diélectrique / SCO.



Figure I.30 : Détermination de la tension V_{SO} , du rapport I_{on}/I_{off} et de la pente sous le seuil (S) sur une courbe de transfert sous forme logarithmique d'un transistor organique en Pentacène [79].

I.13 Influence du diélectrique de grille sur le fonctionnement des OFETs

Dans un transistor organique, l'élément le plus étudié est le semi conducteur car il en constitue la couche active et de nombreuses études sont menées afin d'améliorer sa stabilité, sa morphologie, etc... Mais, le diélectrique de grille en lui-même est aussi essentiel car c'est grâce à lui qu'il peut y avoir accumulation de charges à l'interface avec le semi conducteur organique. Nous avons vu que le transport, qui se fait grâce à la formation du canal conducteur par l'effet de champ, n'a pas lieu dans le volume du film de SCO mais à l'interface avec le diélectrique de grille et que le canal s'étend sur les premières couches moléculaires adjacentes au diélectrique de la grille.

I.13.1 Rugosité

Les mesures par microscopie à force atomique (AFM) caractérisent la topologie de surface des matériaux. Elles renseignent notamment sur la rugosité de surface, la taille et la nature des grains qui constituent la matière. L'état de surface et, plus précisément, les effets de la rugosité de diélectrique sur les performances des OFETs.

Cette influence de la rugosité de l'interface entre le diélectrique et le semi conducteur sur la morphologie du semi conducteur se matérialise par une dépendance de la mobilité des porteurs de charges dans le transistor avec cette rugosité [80]. En effet, lorsque l'interface est rugueuse, les charges vont avoir des difficultés pour se déplacer à l'intérieur d'un grain à cause des défauts d'empilement, i.e. les charges piégées dans les dépressions de la surface du diélectrique ne peuvent se déplacer (Figure I.31). Des études ont montré que le pentacène déposé sur une surface rugueuse présente des grains de petite taille et une importante densité de joints de grains [81] (Figure I.32). Si l'on associe les joints de grains à des pièges, des petits grains conduisent à une importante densité de pièges, expliquant la diminution de la mobilité avec l'augmentation de la rugosité. Ainsi, comme la taille et la qualité des grains augmentent lorsque la rugosité diminue, la conduction des porteurs dans le canal sera favorisée par une interface lisse et par conséquent, une augmentation de la mobilité sera observée.

La rugosité a donc une influence sur la mobilité mais également sur la tension seuil, une densité élevée de pièges conduisant à un décalage de la tension seuil vers les tensions négatives dans le cas de transistors de type p [82].



Figure I.31 : Images $2\mu m x 2\mu m$ de 40 nm de pentacène sur Ta₂O₅ en 3D [38].



Figure I.32 : Images AFM en topologie du pentacène déposé sur une surface de SiO₂ présentant des rugosités différentes (rugosité rms >10 Å) : a)1,7 Å, b) 7,6 Å, c) 54 Å et d) 92 Å. [82].

I.13.2 Permittivité diélectrique

Un des buts de l'électronique organique est de réaliser des dispositifs à faible consommation d'énergie. Pour parvenir à cela, un transistor organique doit fonctionner avec de basses tensions mais avoir un courant qui circule dans son canal assez important. Cependant, le courant de drain dans un transistor dépend directement de la quantité de charges accumulées dans le canal. Mais, dans le cas idéal d'une interface isolant/semi conducteur exempte de pièges et sans dipôles d'interface, La quantité de charges accumulées dans le canal est donnée par

$$Q = C_i (V_{GS} - V_T)$$
 (1.20)

Q ne va dépendre que de la capacité du diélectrique de grille C_i et de la tension appliquée sur la grille V_{GS} corrigée par la tension de seuil V_T

$$C_i = \varepsilon_0 K \frac{S}{d} \tag{I.21}$$

où ε_0 est la permittivité du vide (ε_0 =8.85x10⁻¹² F.m⁻¹), *k* est la constante diélectrique relative de la couche isolante, *S* est sa surface et *d* son épaisseur.

Comme nous l'avons vu précédemment, la mobilité des porteurs de charges dans les transistors organiques est fonction de la tension de grille. La mobilité augmente quand V_G augmente, mais est-ce lié à l'épaisseur du diélectrique *d* ou à sa constante *K*.

Le besoin des OFETs fonctionnant à de plus faibles tensions a amené plusieurs groupes de recherche à s'intéresser aux oxydes (l'oxyde de tantale Ta_2O_5 , l'oxyde de titane TiO₂, et l'oxyde d'aluminium ou alumine Al₂O₃) à forte constante diélectrique [59, 83, 84]. Cet intérêt a été appuyé par une étude de Dimitrakopoulos et coll [85] comparant les performances de transistors organiques en pentacène réalisés avec des diélectriques de même épaisseur mais de permittivités diélectriques différentes. Ils ont montré qu'en plus des diminutions de tensions de fonctionnement des transistors, des mobilités plus importantes étaient obtenues avec des diélectriques ayant de forte constante diélectrique. Si en utilisant un diélectrique de grille à forte constante, un nombre suffisant de porteurs est généré pour remplir les pièges par effet de champ à des tensions de grille plus faibles et des mobilités plus importantes sont observés. Cependant, Veres *et al.* [86] ont montré qu'une augmentation de la mobilité. Cette perte de mobilité des porteurs de charges semble plutôt due à la forte polarité du diélectrique qui localise les charges et les rend ainsi moins mobiles. Il semble donc que

deux mécanismes contradictoires coexistent. La forte constante diélectrique augmente la densité de porteurs de charges et donc la mobilité, mais elle est aussi à la source d'une localisation plus forte des porteurs de charges qui tend à diminuer la mobilité. La diminution de l'épaisseur de la couche diélectrique s'accompagne en général d'une perte de ses propriétés isolantes. En effet, lorsque la couche isolante est trop fine, les charges injectées par la grille peuvent la traverser et arriver jusqu'à l'interface avec le semi conducteur, générant ainsi un courant de fuites.

Les isolants inorganiques requièrent des températures importantes de dépôt qui ne sont pas toujours compatibles avec des substrats plastiques et ils sont susceptibles de se fissurer sous contrainte quand les substrats sont flexibles. Différentes recherches ont montré, par la suite, que les performances extraites de transistors organiques ayant un isolant polymère pouvaient être du même ordre, voire supérieures à celles obtenues avec des isolants inorganiques [38]. Ces matériaux possèdent l'avantage de pouvoir la plupart du temps être déposés par voie en solution, ce qui est donc compatible avec l'un des objectifs de l'électronique organique qui est de réaliser des dispositifs à bas coûts, aussi ne nécessite pas en général d'importantes températures de recuit. Les principaux diélectriques polymères utilisés sont le poly(vinyl phenol) PVP [87], le poly(methyl methacrylate) PMMA [88], le benzocyclobutène (BCB) [89], et L'alcool poly(vinylique) PVA [90].



Figure I.33 : Images AFM d'une couche de pentacène (50 nm) déposée sur une surface de : a) verre, b) SiO₂, c) PMMA et c) PVP. [82].

La Figure I.33 présente les images de microscopie à force atomique (AFM) d'une couche de 50 nm de pentacène déposée sur : verre, Sio₂, PMMA, et PVP. Dans le cas d'un dépôt sur le verre, la couche est composée de grains de petite et présente une rugosité élevée, A l'inverse, des grains de très grande taille et une faible rugosité apparaissent sur la couche de pentacène déposée sur PVP.

Un transistor avec un isolant bicouche, composé d'un diélectrique à forte constante et d'un autre à faible constante peut combiner les avantages de chacun [91]. Celui à forte constante donnerait une grande capacité d'isolant de grille et une importante densité de charges accumulées et celui à faible constante, un diélectrique polymère par exemple, améliorerait la qualité de l'interface et minimiserait les effets de polarisation.



Figure I.34 Images AFM 10µmx10µm de couches de 40nm de pentacène déposées sur : a)PMMA /Ta₂O₅ b) et sur PMMA seul [92].

La Figure I.34 présente des images AFM de pentacène déposées sur la diélectrique bicouche PMMA / Ta_2O_5 . Le film de pentacène est constitué de gros grains d'allures dendritiques, similaires à ceux observés sur le PMMA seul.

I.14 Effet de l'atmosphère ambiante

Le développement de nombreuses applications nécessite que les transistors organiques présentent de bonnes performances, soient stables électriquement et fonctionnent sous de faibles tensions. Leurs stabilités dépendent de leur environnement et les conditions de fonctionnement. Les transistors organiques souffrent cependant d'une certaine instabilité dès qu'ils sont exposés à l'air. Différentes études ont montré que l'atmosphère ambiante et notamment l'humidité de l'air pouvaient dégrader les performances des transistors organiques [93]. Le courant de drain, la mobilité, le rapport I_{On}/I_{Off} tendent à diminuer, la tension de seuil

quant à elle, augmente à mesure que le taux d'humidité dans l'air grandit. Différents mécanismes peuvent expliquer cette dégradation [94, 95].

L'humidité agit, elle, principalement par la diffusion des molécules d'eau au niveau des joints de grains. Ces molécules créent des défauts dans le pentacène qui dégradent la mobilité. Mais ce processus étant lié à la présence de joints de grains, est donc dépendant de la morphologie de la couche de pentacène. Une couche composée de gros grains y sera ainsi moins sensible et pourra avoir une mobilité beaucoup plus stable. L'oxygène de l'air oxyde la couche de pentacène, ce qui y crée des défauts et ajoute des niveaux énergétiques supplémentaires dans sa bande interdite, qui sont responsables en partie de la détérioration de la mobilité. En effet, les molécules d'eau et d'oxygène accentuent le piégeage de charges, ce qui a donc des effets sur la tension de seuil.

Des méthodes d'encapsulation ont été imaginées pour limiter les interactions entre le matériau organique et l'air ambiant. La structure Top Gate, une géométrie offre l'avantage d'encapsuler le matériau organique et donc de limiter les dégradations liées à l'oxygène et l'humidité, le diélectrique joue alors aussi le rôle de couche protectrice, aussi le temps de vie des transistors est amélioré.

I.15 Conclusion

Le premier chapitre avait pour but de donner les principes généraux des caractéristiques des matériaux organiques conducteurs et de donner un aperçu du principe de conduction dans ces solides. La compréhension des mécanismes de transport des charges dans les SCO est issue des modèles développés pour les SCI. Toutefois, le comportement des SCO étant très différent de celui des SCI, la compréhension des mécanismes de transport des charges n'est pas complète.

Cette partie a permis de mettre en avant le principe de fonctionnement des transistors organiques à effet de champ. Leur comportement électrique est différent de celui des matériaux inorganique et le modèle de caractérisation des MOSFET utilisé pour décrire le fonctionnement des OFETs présente des limites. Le transistor organique à effet de champ, étant un transistor en couches minces, va pouvoir présenter plusieurs configurations selon l'ordre dans lequel ces couches vont être déposées, chacune présentant des avantages et inconvénients. Le choix d'une configuration par rapport à une autre se fera donc principalement en fonction des choix technologiques associés à la réalisation du transistor.

50

Le développement des circuits OFET nécessite que les transistors présentent de bonnes performances, qu'ils soient stables, fiables, fonctionnent sous de faibles tensions et le plus souvent de faible consommation. Le choix des SCO et des diélectriques de grille sont des paramètres essentiels pour obtenir de tels dispositifs. La rugosité affecte l'auto-organisation du polymère SC à l'interface, et, par conséquent, sur l'efficacité du transport de charge à l'interface SCO/isolant. Les matériaux organiques sont, plus que les inorganiques, sensibles à l'influence de l'atmosphère ambiante. L'eau peut diffuser à travers les joints de grains, modifier les interactions intermoléculaires, et ainsi rendre plus difficile le transport de charges inter grains. L'exposition à l'air de ces transistors, accentue le décalage de la tension de seuil d'une dégradation de la mobilité et accompagné le rapport I_{On}/I_{Off} .

CHAPITRE II

MODELISATION ANALYTIQUE DU V_{TH} OFET

II.1 Introduction

La méthode la plus simple pour modéliser un composant semi conducteur est la modélisation analytique, qui se fait par une résolution d'un ensemble d'équations mathématiques basées sur des hypothèses simplificatrices.

Les équations de base permettant de simuler l'électrostatique et la conduction électrique dans un semi conducteur sont les équations de Poisson, de continuité et de transport pour les trous et les électrons. La simulation est de plus en plus importante pour comprendre la physique des dispositifs électroniques en profondeur, et d'évaluer les performances limites du transistor organique.

Ce chapitre verra le développement d'un modèle analytique de la tension de seuil d'un transistor organique basé sur la physique du transistor MOSFET avec un profil de dopage de type gaussien du canal. Le modèle analytique de la tension de seuil est développé en basant sur l'analyse du potentiel électrostatique dans le canal qui est obtenu par la résolution du système d'équations unidimensionnel (1D) de Poisson. Nous présenterons aussi l'influence du dopage des régions source-drain sur les performances d'OFET.

II.2 Formulation du modèle

L'équation de Poisson relie le potentiel électrostatique à la densité de charge, elle dérive de la forme local du théorème de gauss c'est à dire de l'équation dite de Maxwell-Gauss

div
$$\vec{E} = \frac{\rho(x, y, z)}{\epsilon}$$
 (II. 1)

Où ϵ est la constante diélectrique du semi-conducteur, \vec{E} le champ électrique.

Comme le champ électrique est relié au potentiel V par la relation suivante :

$$\vec{E} = -\vec{\text{grad}} V$$
 (II. 2)

L'équation de Poisson s'écrit sous la forme :

$$\Delta V = -\frac{q(p-n+N_D^+-N_A^-)}{\epsilon}$$
(II.3)

où N_D^+ et N_A^- représentent les densités d'accepteurs et de donneurs ionisés (Charges fixes), *n* et *p* représentent les densités de porteurs libres électrons et trous (Charges mobiles), ΔV le Laplacien du potentiel, *q* est la charge élémentaire d'électrons.

L'équation de Poisson en 1-D dans le cas d'un transistor a canal long et de type p, donc avec une densité d'électrons négligeable :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{qN_A(x)}{\varepsilon_{SCO}} \tag{II.4}$$

où N_A est le dopage de la couche active (SCO), Ψ est le potentiel électrostatique et ε_{SCO} la permittivité du SCO.

La définition de l'orientation (x-y) utilisée est montrée à la Figure II-1. Nous symboliserons de manière générale les épaisseurs d'isolant par t_i , et du SCO par t_{sco}



Figure II.1 : Structure d'un transistor OFET.

Dans notre cas, nous considérons un profil de dopage de type gaussien dans le SCO (type P). L'expression de la non-uniformité verticale du profil de dopage dans le canal est donnée par :

$$N_A(x) = N_p exp\left[-\left(\frac{x - R_p}{\sigma_p \sqrt{2}}\right)^2\right]$$
(II.5)

où N_p est le pic de la concentration du profil de dopage gaussien, R_p parcours moyen projeté (centre) et σ_p l'écart type de la fonction gaussienne.

L'équation de Poisson 1D (équation II.4) s'écrit alors :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{qN_p}{\varepsilon_{SCO}} \exp\left[-\left(\frac{x-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right)^2\right]$$
(II.6)

Le but ici est de calculer le potentiel électrique ψ près de l'interface isolant/SCO, la distribution de potentiel verticale est obtenue en intégrant l'équation de Poisson 1D en utilisant des conditions aux limites.

Après deux intégrations de l'équation (II.6) nous trouvons l'expression du potentiel $\psi(x)$

$$\psi(x) = \frac{qN_p\sigma_p^2\sqrt{\pi}}{\varepsilon_{SCO}} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} exp\left[-\left(\frac{x-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right)^2 \right] + \left(\frac{x-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right) erf\left(\frac{x-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right) \right] + Ax + B \qquad (\text{II. 7})$$

$$\psi(x) = \frac{qN_p \sigma_p^2 \sqrt{\pi}}{\varepsilon_{SCO}} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} exp(-\tau^2) + \tau \operatorname{erf}(\tau) \right] + Ax + B$$
(II.8)

Avec $\tau = \frac{x - R_p}{\sigma_p \sqrt{2}}$ pour simplifier la notation.

où $0 \le x \le t_{SCO}$, *A* et *B* sont des constantes (dans la direction-x) à déterminer par la condition aux limites (Neumann) :

$$\varepsilon_{SCO} \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=t_{SCO}} = \frac{\varepsilon_i}{t_i} \left(V_{gs} - V_{FB} - \psi_s \right)$$
(II. 9)
$$\psi|_{x=0} = 0$$

où t_i et ε_i sont respectivement l'épaisseur et la permittivité de la couche diélectrique (isolant), ε_{SCO} la permittivité de la couche active (semi conducteur organique), V_{gs} est la tension appliquée à la grille, V_{FB} est la tension de bande plate (« flat band » en anglais), et ψ_s est le potentiel de surface.

pour $\psi|_{x=0} = 0$ *B* s'exprime par

$$B = -\frac{qN_p\sigma_p^2\sqrt{\pi}}{\varepsilon_{SCO}} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} exp\left[-\left(\frac{-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right)^2 \right] + \left(\frac{-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right) \right]$$
(II. 10)

pour

$$\varepsilon_{SCO} \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=t_{SCO}} = \frac{\varepsilon_i}{t_i} \left(V_{gS} - V_{FB} - \psi_s \right) \qquad A \text{ s'exprime par}$$

$$A = \frac{c_i}{\varepsilon_{SCO}} \left(V_{gs} - V_{FB} - \psi_s \right) - \frac{q N_p \sigma_p \sqrt{\pi}}{\varepsilon_{SCO} \sqrt{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{t_{SCO} - R_p}{\sigma_p \sqrt{2}}\right)$$
(II. 11)

En remplaçant (II.10) et (II.11) dans (II.7), nous avons

$$\psi(x) = \frac{qN_p\sigma_p^2\sqrt{\pi}}{\varepsilon_{SCO}} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} exp \left[-\left(\frac{x-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right)^2 \right] + \left(\frac{x-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{x-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right) \right] \\ + \left[\frac{c_i}{\varepsilon_{SCO}} \left(V_{gs} - V_{FB} - \psi_s \right) - \frac{qN_p\sigma_p\sqrt{\pi}}{\varepsilon_{SCO}\sqrt{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{t_{SCO} - R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right) \right] x \\ - \frac{qN_p\sigma_p^2\sqrt{\pi}}{\varepsilon_{SCO}} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} exp \left[-\left(\frac{-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right)^2 \right] + \left(\frac{-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{-R_p}{\sigma_p\sqrt{2}}\right) \right]$$
(II. 12)

$$\psi(x) = \frac{qN_p\sigma_p^2\sqrt{\pi}}{\varepsilon_{SCO}} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} exp(-\tau^2) + \tau \operatorname{erf}(\tau) - \frac{1}{\sqrt{\pi}} exp(-\mathcal{C}^2) - \mathcal{C} \operatorname{erf}(\mathcal{C}) \right] + \left[\frac{c_i}{\varepsilon_{SCO}} \left(V_{gs} - V_{FB} - \psi_s \right) - \frac{qN_p\sigma_p\sqrt{\pi}}{\varepsilon_{SCO}\sqrt{2}} \operatorname{erf}(\mathcal{D}) \right] x$$
(II. 13)

avec
$$\tau = \frac{x - R_p}{\sigma_p \sqrt{2}}$$
 $C = \frac{-R_p}{\sigma_p \sqrt{2}}$ $D = \frac{t_{SCO} - R_p}{\sigma_p \sqrt{2}}$

II.3 Dérivation du potentiel de surface

Le potentiel de surface ψ_s à l'interface entre l'isolant et le SCO est calculée grâce a la condition suivante : $\psi_s \equiv \psi(x = t_{SCO})$, donc d'après l'équation II.13 on a

$$\psi_{s}\left[1 + \frac{c_{i} t_{SCO}}{\varepsilon_{SCO}}\right] = \frac{qN_{p}\sigma_{p}^{2}\sqrt{\pi}}{\varepsilon_{SCO}} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}exp(-D^{2}) - \frac{1}{\sqrt{\pi}}exp(-C^{2}) + D\operatorname{erf}(D) - C\operatorname{erf}(C) - \frac{t_{SCO}}{\sigma_{p}\sqrt{2}}\operatorname{erf}(D)\right] + \frac{c_{i} t_{SCO}}{\varepsilon_{SCO}}V_{gs} - \frac{c_{i} t_{SCO}}{\varepsilon_{SCO}}V_{FB}$$
(II.14)

Après un arrangement mathématique, l'expression du potentiel de surface ψ_s s'écrit

$$\psi_s = \frac{qN_p \sigma_p^2 \sqrt{\pi}}{\varepsilon_{sco} + c_i t_{sco}} Z + \frac{c_i t_{sco}}{\varepsilon_{sco} + c_i t_{sco}} V_{gs} - \frac{c_i t_{sco}}{\varepsilon_{sco} + c_i t_{sco}} V_{FB}$$
(II.15)

avec
$$Z = \frac{1}{\sqrt{\pi}} exp(-D^2) - \frac{1}{\sqrt{\pi}} exp(-C^2) + D \operatorname{erf}(D) - C \operatorname{erf}(C) - \frac{t_{SCO}}{\sigma_p \sqrt{2}} \operatorname{erf}(D)$$
 (II. 16)

II.4 Dérivation de la tension de seuil

La tension de seuil est déterminée à partir de l'expression du potentiel de surface en utilisant la condition suivante

$$\psi_s|_{V_{gs}=V_{Th}} = 2\varphi_F \tag{II. 17}$$

En remplaçant (II.17) dans l'expression du potentiel de surface (II.15), on obtient :

$$\frac{c_i t_{SCO}}{\varepsilon_{SCO} + c_i t_{SCO}} V_{Th} = 2\varphi_F + \frac{c_i t_{SCO}}{\varepsilon_{SCO} + c_i t_{SCO}} V_{FB} - \frac{qN_p \sigma_p^2 \sqrt{\pi}}{\varepsilon_{SCO} + c_i t_{SCO}} Z$$
(II. 18)

Nous obtenons l'expression de la tension de seuil

$$V_{Th} = 2 \frac{\varepsilon_{SCO} + c_i t_{SCO}}{c_i t_{SCO}} \varphi_F + V_{FB} - \frac{q N_p \sigma_p^2 \sqrt{\pi}}{c_i t_{SCO}} Z$$
(II. 19)

Où ϕ_F correspondant à l'écart entre le potentiel intrinsèque et le potentiel de Fermi du semi conducteur dopé de type accepteur. ϕ_F s'exprime comme:

$$\varphi_F = \frac{KT}{q} \ln\left(\frac{N_A}{n_i}\right) \tag{II.20}$$

où N_A est le dopage du SCO et n_i est la concentration intrinsèque du SCO.

$$n_i = \sqrt{N_C N_V \exp\left(-\frac{E_g}{KT}\right)}$$
(II. 21)

où Nc et Nv sont respectivement la densité effective d'états des électrons dans la bande de conduction (LUMO) et la densité effective d'états des trous dans la bande de valence (HOMO).

II.5 La simulation numérique d'un transistor organique

Tout au long de nos travaux, nous avons utilisé le simulateur SILVACO sur lequel nous avons élaboré une structure OFET (Organic Field Effect transistor). L'avantage majeur de ce type de simulateurs est qu'il donne la possibilité de visualiser des phénomènes physiques, il fournit des informations sur la distribution interne de variables telles que les concentrations des porteurs, les lignes de courant, la répartition du champ électrique et le potentiel.

La figure II.2 montre la coupe transversale d'une des structures développées au cours des simulations 2-D avec un dopage gaussien du canal (La simulation via le logiciel ATLAS sera détaillée dans le Chapitre III)

Nous avons considéré les paramètres de pentacène dans le simulateur Atlas à la température de 300K: l'affinité électronique $\chi = 3.2$ eV, le gap d'énergie $E_g = 1,85$ eV, la permittivité $\varepsilon_{sco} = 3.5$, les densités respectives de la bande de conduction $N_C = 1.10^{21}$ cm⁻³ et de la bande de valence $N_V = 1.10^{21}$ cm⁻³ et enfin la densité intrinsèque de charge $n_i=3.10^5$ cm⁻³, une fonction gaussienne décrit le profil de distribution du dopage dans le SCO ($t_{sco}=100$ nm), une couche d'isolant (l'oxyde d'aluminium ou alumine Al₂O₃) est introduite entre la grille (Al) et le SCO ($t_i=20$ nm). Sa permittivité est d'environ 9.

Le profil du dopage gaussien et de potentiel de surface (régime linéaire et saturation) audessus de l'interface du Pentacène / Al_2O_3 sont représentés dans les figures II.3 (a) et (b).



Figure II.2 : profil typique du dopage gaussien dans la structure étudiée, (W=1mm, $L=10\mu m$ $t_i=20$ nm, $t_{sco}=100$ nm).



Figure II.3 : profil typique du potentiel de surface dans la structure étudiée : a) régime linéaire ($V_{gs} = -10V V_{ds} = -0.5V$), b) régime de saturation ($V_{gs} = V_{ds} = -10V$)

Nous allons, dans cette section, faire une étude comparative de la variation de la tension de seuil en fonction de t_{sco} , t_i , ε , R_p et σ_p pour notre modèle avec celles obtenue par la simulation numériques 2-D.

Les paramètres utilisés pour la simulation 2-D SILVACO sont résumés dans le tableau II.1.

Matériau	Paramètre	Valeur
Pentacène	Bande interdite (gap) Densité effective de la bande de conduction Densité effective de la bande de valence Permittivité Affinité (LUMO) Dopage gaussian (Accepteur P Type)	$1.85 \text{ eV} \\ 1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3} \\ 1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3} \\ 3.5 \\ 3.2 \text{ eV} \\ \text{(Pic) } 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Al ₂ O ₃	Permittivité	9
Au (contacts S&D)	Travail de sortie	5 eV
Al (contact G)	Travail de sortie	4.1 eV

Tableau II.1 : les paramètres de simulation SILVACO

La figure II.4 représente la variation de la *caractéristique de transfert* en fonction de t_{sco}, t_i, ε , R_p et σ_p



(a)

58



Figure II.4 : Variation de la caractéristique de transfert pour différentes : a) épaisseur de SCO, b) épaisseur d'isolant, c) permittivité, d) centre de la fonction gaussienne.
Nous comparons la tension de seuil simulée sous Silvaco avec celle calculée par (II.19). Ces comparaisons sont faites avec des paramètres identiques ($E_{g,\chi}$, ε , N_A , N_p , t_{SCO} , t_i).

Epaisseur du SCO t _{sco} [nm]	100	200	300	400	500
V _{Th} [V] (SILVACO)	1.9582	0.8171	0.7199	0.6866	0.6711
V _{Th} [V] (II.19)	1.3407	1.0310	0.9278	0.8762	0.8452

Le tableau II.2 illustre la variation de la tension de seuil (V_{Th}) en fonction d'épaisseur t_{sco}

Tableau II.2 : la tension de seuil (V_{Th}) en fonction de t_{sco}

 $(R_p = 50 \text{ nm}, \sigma_p = 10 \text{ nm}, t_i = 20 \text{ nm}, \epsilon_i = 9, V_{FB} = -0.77 \text{ V}).$

Le tableau II.3 illustre la variation de la tension de seuil (V_{Th}) en fonction d'épaisseur t_i

Epaisseur d'isolant t _i [nm]	10	20	60	80
V _{Th} [V] (SILVACO)	1.5730	1.9582	2.7360	3.5176
V _{Th} [V] (II.19)	1.0310	1.3407	1.9601	2.5795

Tableau II.3 : la tension de seuil (V_{Th}) en fonction de t_i (R_p= 50 nm, σ_p =10 nm, t_{sco} = 100 nm, ϵ_i =9)

Le tableau II.4 illustre la variation de la tension de seuil (V_{Th}) en fonction de la permittivité ε_i

Permittivité d'isolant ei	3.9	8	12	18	22	26
V _{Th} [V] (SILVACO)	2.9597	2.1036	1.6569	1.3399	1.2195	1.1358
V _{Th} [V] (II.19)	2.1507	1.4181	1.1859	1.0310	0.9747	0.9357

Tableau II.4 : la tension de seuil (V_{Th}) en fonction de ε_i (R_p= 50 nm, σ_p =10 nm, t_i = 20 nm, t_{sco} = 100 nm)

Le tableau II.5 illustre la variation de la tension de seuil (V_{Th}) en fonction de R_p

R _p [nm]	0	20	40	60	70	80	90	95
V _{Th} [V] (SILVACO)	0.9801	1.1445	1.5068	3.2810	6.9611	0.6093	0.6093	0.6093
V _{Th} [V] (II.19)	0.8776	1.0396	1.2401	1.4413	1.5406	1.6189	1.5753	1.3354

Tableau II.5 : la tension de seuil (V_{Th}) en fonction de R_p

 $(\sigma_p = 10 \text{ nm}, t_i = 20 \text{ nm}, t_{sco} = 100 \text{ nm}, \varepsilon_i = 9)$

La comparaison des résultats obtenus montre que les deux modèles présentent des valeurs de tension de seuil comparables, mais notre modèle besoin des informations (paramètres) plus approfondies.

II.6 Influence du dopage des régions source-drain

Pour étudier l'influence du dopage des régions source-drain sur les performances d'OFET, la structure développée sur Atlas possède un film de pentacène intrinsèque et les régions de source et de drain (Au) sont fortement dopées (P^+) de type accepteur (i.e. une conduction assurée par des trous) comme explicité figure II.5 et figure II.6.



Figure II.5 : a) Schéma d'un OFET non traité avec diagramme de bande d'énergie de semiconducteur intrinsèque / métal, b) Schéma d'un OFET avec contacts dopés et les changements des niveaux d'énergies introduites par le dopage des contacts source-drain.



Figure II.6 : la structure d'un transistor OFET développée sur Atlas ($L=40\mu m$, W=1mm) a) non traité, b) avec contacts dopés.

L'injection de charges par les électrodes source et drain dans le SCO dépend de la position du niveau HOMO, pour l'injection de trous, et du niveau LUMO, pour l'injection d'électrons, du SCO par rapport au niveau de Fermi du métal constituant les contacts [96, 97]. Dans notre cas, pour l'injection de trous, la différence entre le niveau de Fermi du métal et le niveau HOMO du SCO sera donnée par la différence entre le travail de sortie du métal et le potentiel d'ionisation du SCO. Dans le modèle barrière de Schottky, la hauteur de barrière Schottky pour les trous ϕ_{Bh} est donnée par l'équation suivante :

$$\phi_{Bh} = \chi + E_g - \phi_m \tag{II.22}$$

où χ est l'affinité électronique de la couche active (pentacène), E_g représente l'énergie de gap, et ϕ_m est le travail de sortie de l'électrode métallique.

Par conséquent, il peut y avoir une barrière d'injection, même dans le système métalorganique bien choisi, et les hauteurs de barrière mesurées pour l'interface Au / Pentacène sont rapportées dans la littérature entre 0.4 et 0.9 eV [98-99]. Dans ce qui précède, nous n'avons pas changé le niveau de vide dans notre simulation, mais nous avons changé la hauteur de barrière Schottky en modifiant l'affinité électronique du SCO, une barrière de 0.5 eV a été choisie à l'interface Au / Pentacène.

La configuration contacts hauts- grille basse a été choisie pour réaliser ces travaux. (Figure II.5). Elle est constituée de l'empilement successif d'une couche de 20 nm d'Al (électrode de grille), recouverte d'une couche de Al_2O_3 (l'oxyde d'aluminium ou alumine) d'épaisseur 30 nm (isolant de grille) avec une capacité de 55 nF cm⁻², puis d'une couche de pentacène d'épaisseur 50 nm. Les électrodes source et drain en or (Au), présentant un travail de sortie élevé (5eV), les électrodes ont une épaisseur de 80 nm [99].

Matériau	Paramètre	Valeur
Pentacène	Bande interdite (gap) Densité effective de la bande de conduction Densité effective de la bande de valence Permittivité Affinité (LUMO) Dopage sorce-drain (Accepteur P Type)	$1.8 \text{ eV} \\ 2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3} \\ 2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3} \\ 4 \\ 3.7 \text{ eV} \\ 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$
Al ₂ O ₃	Permittivité	2
Au (contacts S&D)	Travail de sortie	5 eV
Al (contact G)	Travail de sortie	4.1 eV

Les paramètres utilisés dans la simulation sont résumés dans le tableau II.6.

La Figure II.7 montre l'évolution des caractéristiques de transfert mesurées pour V_{ds1}= -0.2 V, V_{ds2} = -0.5 V et V_{ds3} =-1 V de la structure développée sur Atlas avec et sans contacts dopés. Une amélioration remarquable pour les caractéristiques de transfert concernant la structure comporte des régions source-drain fortement dopées, ces régions agissent comme un réservoir de charges.





(b)



Figure II.7 Caractéristiques de transfert avec et sans contacts dopés a) V_{ds1} =-0.2 V; b) V_{ds2} =-0.5 V; c) V_{ds3} =-1 V.

Les simulations donnent également accès aux paramètres physiques tels que le flux du courant et la position du niveau de Fermi par rapport aux bandes. La figure II.8 présente le profil de flux du courant d'un OFET, le transport de charges a lieu dans l'interface avec Al_2O_3 le diélectrique de grille. La figure II.9 montre les diagrammes de bandes avec la position de son niveau de Fermi pour contacts non traités et contacts dopés.



Figure II.8 : flux du courant d'OFET a)contact non traité, b) avec contacts dopés.



Figure II.9 : Diagrammes de bandes représentant le niveau de fermi pour a)contact non traité, b) avec contacts dopés.

Une comparaison des caractéristiques de transfert entre les résultats expérimentales et les résultats simulés a été représentée sur les figures II.10 et II.11 respectivement pour différentes valeurs de V_{ds} ($V_{ds1} = -0.2$ V, $V_{ds2} = -0.5$ V, $V_{ds1} = -1$ V). Les figures II.11 (a), (b) et (c) présentent les caractéristiques de transfert en échelle logarithmique pour les trois valeurs de V_{ds} respectivement.

On peut voir clairement sur les figures II.10 et II.11, que nos résultats pour les caractéristiques de transfert sont en accord avec des résultats expérimentaux [99].

Nos simulations présentes un courant I_{off} de l'ordre 10^{-14} A, aussi la tension de seuil est inférieure à celle obtenue expérimentalement si en comparant ces valeurs à celle obtenue expérimentalement 10 pA et -4V respectivement. Cette différence est liée probablement à la méthode de fabrication de la couche isolante et la méthode de dopage des régions source-drain (qualité d'interface).



Figure II.10 : Comparaison des caractéristiques de transfert entre les résultats expérimentales [99] et nos résultats de simulation sous Atlas/Silvaco pour : a) V_{ds1}=-0.2 V; b) V_{ds2}=-0.5 V; c) V_{ds3}=-1 V.



Figure II.11 : Comparaison des caractéristiques de transfert en échelle logarithmique entre les résultats expérimentales [99] et nos résultats de simulation sous Atlas/Silvaco pour : a) V_{ds1}=-0.2 V; b) V_{ds2}=-0.5 V; c) V_{ds3}=-1 V.

La question des contacts est d'une grande importance. La mobilité μ_{OFET} dépend non seulement du transport des charges à l'interface semi conducteur/diélectrique mais aussi de l'injection et de la collection des charges aux électrodes source et drain. La résistance de contact R_C est gouvernée par la qualité de l'interface semi conducteur/électrode, qui dépend de la morphologie du semi conducteur et de la barrière énergétique d'injection à l'interface. Nous utilisons la méthode de la ligne à transmission (Transmission Line Method « TLM ») pour obtenir la résistance de contact [100]. Cette méthode, initialement développée pour l'étude de transistor à base de silicium amorphe a par la suite été largement utilisée pour extraire la résistance de contact R_C dans les OFETs [101]. Les résistances de contact ont pour effet de diminuer le courant ; en conséquence, ne pas en tenir compte peut conduire à sousestimer la mobilité réelle du semi conducteur. Son principe repose sur l'équation II.23 décrivant la résistance totale R_{on} du transistor en régime linéaire.

$$R_{on} = \left(\frac{\partial V_{ds}}{\partial I_{ds}}\right)_{V_g} = R_{canal} + R_c = \frac{L}{W\mu C_i (V_{gs} - V_{Th})} + R_c$$
(II. 23)

La résistance d'un transistor, d'une façon générale, peut être modélisée comme une résistance entre la source et le canal et une autre résistance entre le canal et le drain, tous les deux en série avec le canal, comme illustré sur la figure II.12.



Figure II.12 : Résistance de contact R_s et R_D en série avec la résistance du canal.

Pour l'analyse TLM, le transistor doit fonctionner en régime linéaire. Dans le régime linéaire le potentiel des électrodes source et drain est similaire. En comparaison avec le régime de saturation le potentiel à l'électrode de drain est très élevé, alors la résistance de contact serait mesurée relativement plus élevée que prévu. Pour calculer la résistance de contact en régime linéaire, il faut calculer la résistance totale d'une série de transistors de différentes longueurs de canal et on trace R_{on} en fonction de L. La figure II.13 représente le tracé de la résistance totale normalisée ($R_{on} *W = (V_{ds}/I_{ds})*W$) en fonction de L, à V_g - $V_{th} = -1.2$ V et pour $V_{ds} = -0.5$ V. La pente de la régression linéaire de chaque droite donne la résistance du canal en fonction de L pour un certain V_{gs} , et la résistance de contact est donnée par l'intersection de cette droite à L=0 avec l'axe des ordonnées (figure II.13).



Figure II.13 : Résistance total normalisée expérimentale (rouge) et ATLAS de Silvaco (bleu) en fonction de la longueur du canal L pour contact non traité et contacts dopés.

Les résultats expérimentaux présents des résistances de contacte pour contact non traité et contacts dopés égale à 0.39 M Ω cm et 0.14 M Ω cm respectivement, avec $\Delta R_c=0.25$ M Ω cm [99]. Dans notre simulation des valeurs de 0.32 M Ω cm et 0.11 M Ω cm pour contact non traité et contacts dopés respectivement a été calculée avec $\Delta R_c=0.21$ M Ω cm.

Une explication à une telle différence entre les deux architectures se trouve dans les régions fortement dopées pour l'injection de charges et la réduction des résistances de contacts. Ainsi pour un même potentiel, l'injection de charges est plus efficace dans la configuration contacts dopées que dans la configuration inverse. La résistance de contact est alors beaucoup plus faible lorsque les électrodes sources-drain sont dopées près de l'interface électrode/pentacène que lorsqu'elles ne sont pas dopées.

II.7 conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un modèle analytique de la tension de seuil d'un transistor organique avec un profil de dopage de type gaussien du canal, ce modèle est

développé en basant sur la résolution du système d'équations unidimensionnel (1D) de Poisson. Une expression de la tension de seuil a été obtenue en utilisant les conditions aux limites.

Une barrière de potentiel ou des résistances de contact peuvent limiter l'injection de charges dans le semi-conducteur. La mobilité va varier en fonction de la densité de porteurs dans le canal et le courant dans le canal n'est plus uniquement dominé par les propriétés du semi-conducteur, mais aussi par celles des contacts. Ces résistances ont été calculées par la méthode TLM (« Transmission Line Method »). Sachant que si la résistance de contact est assez élevée, étant donnée la forte barrière d'injection ce qui réduit le courant. Un fort dopage est nécessaire pour permettre une résistance plus faible, donc le courant de l'état « on » sera augmenté par une diminution de la résistance série.

CHAPITRE III

MODELISATION ET SIMULATION DU TRANSISTOR ORGANIQUE PAR ATLAS

III.1 Introduction

La simulation numérique, appelée encore simulation informatique, est en fait une adaptation de la modélisation mathématique aux moyens informatiques. Le domaine de la modélisation et la simulation des dispositifs organiques est considéré comme un domaine très important, dans le but d'économiser le temps et le coût de développement, et ainsi de pouvoir envisager et optimiser des solutions pour améliorer les performances des dispositifs. Cette thèse avait pour objectif d'étudier la modélisation des transistors organiques, d'un point de vue scientifique, la modélisation représente une compréhension du comportement physique de ce composant ; et d'un point de vue industriel, elle montre une grande importance lors de la conception d'une électronique, en permettant de simuler et donc de prédire le fonctionnement des circuits conçus.

Nous utilisons ici Silvaco (ATLAS) comme outil TCAD de simulation ; celui ci est très connu dans le domaine de la simulation numérique. Son principe est basé sur un système d'équations différentielles traduisant localement le comportement physique d'un composant, comme l'équation de Poisson, l'équation de continuité etc. Ces équations sont résolues globalement par la méthode des éléments finis, ce qui permet d'avoir l'ensemble des grandeurs physiques (densité de courant, potentiel, ...) pour chaque position à l'intérieur de ces composants [102]. Nous allons valider notre modèle en présentant les caractéristiques simulées en comparaison avec celles mesurées expérimentalement.

III.2 Présentation d'ATLAS

Le logiciel de simulation ATLAS (de SILVACO) permet la modélisation 2D et 3D des composants. Cet outil sert à la modélisation des dispositifs à semi conducteur avant leur fabrication. Il est très utile dans le développement de beaucoup de projets de recherches. Dans la figure III.1, nous présentons les informations d'entrée et de sortie pour ATLAS. La plupart des simulations réalisées par ATLAS utilisent deux fichiers d'entrée :

- un fichier script contenant les commandes pour que ATLAS s'exécute (environnement DECKBUILD utilisé),
- ➢ un fichier structure définissant l'empilement à simuler.

Le simulateur fournit 3 types de fichiers de sortie :

un fichier Runtime qui donne la progression, les erreurs et les messages d'avertissements pendant la simulation,

- un fichier *log* stockant toutes les valeurs de tensions et des courants provenant de l'analyse du dispositif simule (c'est le fichier du comportement électrique),
- un fichier solution stockant les données 2D et 3D correspondant aux valeurs de variables spécifiques à l'intérieur du dispositif, à une tension donnée.

Les deux derniers fichiers sont traités par l'outil de visualisation *TonyPlot*. Tonyplot permet de visualiser la structure en 2D ou 3D et les caractéristiques électriques demandées.





En plus du comportement électrique (externe), l'avantage majeur de ce type de simulateurs est qu'il donne la possibilité de visualiser des phénomènes physiques difficilement accessibles et donc observables. Il fournit des informations sur la distribution interne de variables telles que les concentrations des porteurs, les lignes de courant, la répartition du champ électrique ou le potentiel. Ces données sont importantes pour la conception et l'optimisation des procédés technologiques elles sont obtenues en résolvant numériquement l'équation de Poisson et les équations de continuité des champs et des potentiels en deux dimensions en un nombre fini de points formant le maillage de la structure, défini par l'utilisateur ou par le programme.

III.3 Simulation avec les paramètres prédéfinis

Dans ce travail, la simulation a été effectuée avec un modèle d'OFET de type P qui est le plus observé. Cependant, le modèle peut être facilement transposé à un OFET de type N par un changement de la couche active et les contactes source et drain.

Le système d'équation de Poisson et les équations de continuité est le suivant, exprimé pour les trous (un seul type de charge) :

$$\varepsilon \nabla^2 V = -\rho q \tag{III.1}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \, div \vec{J_p} + G_p - R_p \tag{III.2}$$

Ainsi la densité de courant $\overrightarrow{J_p}$ est exprimée par le modèle de dérive-diffusion :

$$\vec{J_p} = q\mu_p p \vec{E_p} - q D_p \nabla p \tag{III.3}$$

A noter aussi que tous les modèles proposés dans le chapitre I (GDM, MTR) sont basées sur le modèle de dérive-diffusion. Même si il a été initialement développé pour les semi conducteurs inorganiques, il a été étendu pour tenir compte des caractéristiques semi conducteurs organiques.

Le pentacène est composé de cinq cycles benzéniques fusionnés, constituant une molécule planaire (Figure III.2). Le pentacène (Pn : $C_{22}H_{14}$) est un semi conducteur organique de type P qui a suscité un grand intérêt dès l'avènement de l'électronique organique. En 1991, Horowitz et al réalisent le premier transistor à base de pentacène [103]. Depuis, d'importants progrès ont été réalisés et des mobilités de l'ordre de 1,5 cm²/Vs, rivalisant avec celles du silicium amorphe ont été atteintes [104]. Le pentacène est donc l'un des matériaux semi conducteurs organiques à molécule courte qui a suscité le plus d'intérêt en raison de sa mobilité sous effet de champ et de sa bonne stabilité [105]. Actuellement, ces transistors atteignent des mobilités approchant 5-6 cm²/Vs [106] en film mince et jusqu'à 35 cm²/Vs pour des monocristaux à température ambiante et même 58 cm²/Vs à 225 K [27]. Alors le pentacène est devenu au cours du temps le semi conducteur organique le plus étudié. C'est un matériau de référence.



Figure III.2 : a)Unité moléculaire du pentacène (molécule constituée de cinq cycles benzéniques: $C_{22}H_{14}$), b) Image par microscope à force atomique (AFM) d'une molécule de pentacène [80].

Les bandes de transport dans les organiques sont plus étroites que celles des inorganiques et la structure de bande est facilement perturbée par le désordre dans ces matériaux. La bande interdite des matériaux organiques est relativement large (1,7 à 2,8 eV) [107, 108].

Le transistor mesuré pour cette étude est un transistor organique à base de pentacène en géométrie top contact avec grille commune basse (Figure III.3) [109]. Il est constitué de l'empilement successif d'une couche de 20 nm d'Al (électrode de grille), recouverte d'une couche de Al_2O_3 (l'oxyde d'aluminium ou alumine) d'épaisseur 5.7 nm (isolant de grille) puis d'une couche de pentacène d'épaisseur 30 nm. Les électrodes source et drain en or (Au), présentant un travail de sortie élevé (5eV), permettent une bonne injection des trous vers la bande HOMO du pentacène, les électrodes ont une épaisseur de 30 nm. On suppose que les contacts S&D/SCO sont de type Schottky avec un travail de sortie de l'électrode ajusté au niveau HOMO, équivalent à un contact quasi-ohmique. Ce transistor a une longueur de canal de 10 µm et une largeur de 100 µm.

Dans le but d'intégrer les transistors à des circuits fonctionnant à faible tension (2-3 V), la capacité de la couche isolante doit être proche de 0,5 μ F/cm². Pour atteindre cette capacité avec une permittivité de diélectrique (3~5 eV) l'épaisseur de la couche isolante doit être inférieure à < 10 nm. L'oxyde d'aluminium est un diélectrique ayant une permittivité peu élevée (ϵ_r , Al2O3 = 4,5), avec une épaisseur de 5.7 nm, la capacité par unité de surface est alors de 0,7 μ F/cm². Dans un premier temps, les grandeurs prédéfinis dans le logiciel ATLAS sont utilisées pour la simulation, en précisant seulement les valeurs, du travail de sortie des électrodes de drain et de source en or (φ =5eV), de grille en Al (φ =4 ,1 eV) et la permittivité relative de Al₂O₃ (ϵ_r =4,5).



Figure III.3 : Structure TCBG du transistor OFET simulé par ATLAS ($L=10 \mu m$, $W=100 \mu m$).



Figure III.4 : Caractéristiques de : a) sortie, et b) transfert obtenue avec la simulation en régime linéaire (V_{ds} =-0.1V) pour L= 10 µm et W=100 µm.

Une première implémentation sans optimisation des paramètres (figure III.4) n'a pas été suffisante: les caractéristiques simulées sont très loin de ce qui est obtenu expérimentalement. Ceci est principalement du a une mauvaise définition des valeurs des paramètres initiaux dans le logiciel ATLAS, un travail d'ajustement de paramètres de la couche active est donc nécessaire.

III.4 Ajustement des paramètres pour la simulation

Pour modéliser un matériau semi conducteur, il faut d'abord spécifier les paramètres électroniques que sont la bande interdite Eg, la permittivité relative ε_r , l'affinité électronique χ , la densité effective d'états dans la bande de conduction N_C, la densité effective d'états dans la bande de valence N_V. Les paramètres utilisés dans la simulation sont rassemblés dans le tableau III.1.

Matériau	Paramètre	Valeur
	Bande interdite (gap)	2.8 eV
	Densité effective de la bande de conduction	$2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$
Pentacène	Densité effective de la bande de valence	$2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$
	Permittivité	4.0
	Affinité (LUMO)	2.2 eV
	Dopage (Accepteur P Type)	$7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
Al ₂ O ₃	Permittivité	4.5
(isolant de grille)	Epaisseur	5.7 nm
Au (contacts S&D)	Travail de sortie	5.1 eV
Al (contact G)	Travail de sortie	4.1 eV

Tableau III.1 : Les paramètres de simulation [62, 68, 110]

La densité effective d'états dans la bande de conduction N_C , la densité effective d'états dans la bande de valence N_V variant de 10^{19} jusqu'à 6×10^{21} cm⁻³ ont été rapportées pour le pentacène [111]. Le dopage d'un semi conducteur organique augmente la densité de porteurs de charges (électrons ou trous), en ajoutant des espèces donneuses (dopage de type n) ou accepteurs (dopage de type p) d'électrons. Ces additifs vont respectivement réduire ou oxyder la chaîne polymère et faire apparaître des charges mobiles, entraînant une forte augmentation de la conductivité avec la concentration de dopant. On est tenté de dire que, comme le pentacène non-dopé est plutôt un isolant organique qu'un semi-conducteur, les OFETs à pentacène non-dopé disposent de très peu de porteurs intrinsèques ce qui influe négativement sur le transport des charges, aussi les dispositifs à pentacène dopé ont une résistance de contact faible [112]. Avec les paramètres cités précédemment on obtient alors les caractéristiques de sortie et de transfert présentée dans la figure III.5.



Figure III.5 : Comparaison des résultats expérimentale (triangle) et ATLAS de Silvaco (carré) : (a) caractéristiques de sortie, b) caractéristiques de transfert.

Nous remarquons une différence entre les courbes expérimentale et les courbes simulés, cette différence a plusieurs raisons. La première et la principale, est le fait que la simulation n'a pas été pris en compte les densités de pièges. Une seconde raison est que les modèles, que nous utilisons ne prennent pas en compte les effets de type Poole-Frenkel. En fait, l'effet Poole-Frenkel est surtout utile pour justifier le comportement de la mobilité en présence d'un champ électrique.

III.4.1 Modélisation de Piégeage

Les pièges dans la couche active sont considérés comme des pièges profonds. On suppose des niveaux discrets de pièges et l'on définit les niveaux accepteur (E_{tA}) et donneur (E_{tD}) relativement aux niveaux HOMO et LUMO, comme indiqué figure III.6.



Figure III.6 : Définition des niveaux (accepteur et donneur) d'énergie des pièges [102].

Les semi conducteurs organiques contiennent de nombreux défauts, plusieurs valeurs sont rapportées dans la littérature comme en témoigne le tableau III.2 ci-dessous.

Energie (eV)	Densité (cm ⁻³ eV ⁻¹)	Référence
0,35±0,05	$3x10^{14}$	[113]
0,21±0,03	1×10^{15}	[115]
1,08	$9,6x10^{14}$	[114]
0,31	$6,5 \times 10^{15}$	[117]
~0,5	$3x10^{12}$	[115]
~0,5	$2,2x10^{12}$	

Tableau III.2 : Densité et énergie des pièges rencontrés dans le pentacène

Dans ATLAS il nous faut entrer une densité de pièges pour la bande de valence (LUMO) et une énergie moyenne de la profondeur de ces pièges, nous pouvons définir à l'aide d'une commande bien précise la densité de pièges par la commande *TRAP*. Par exemple, la déclaration:

trap e.level = 0.5 acceptor density 2e15 définit une densité de l'ordre $2x10^{15}$ pour une énergie de 0,5 eV pour la bande LUMO.

III.4.2 Modèle du transport

Afin de tenir compte du désordre structural des matériaux organiques (SCO amorphes) et par extension du mécanisme de conduction par sauts, on utilise la mobilité de type *Poole-Frenkel*. La conduction par effet Poole-Frenkel est un mécanisme de transport de porteurs de charges bien connu dans les matériaux semi conducteurs inorganiques [116], établit par *Frenkel* pour expliquer l'augmentation de la conductivité dans les isolants et les semi conducteurs lors d'une application d'un champ électrique élevé par la formule suivante

$$\mu(E) = \mu_o \exp\left(\beta \sqrt{E}\right) \tag{III.4}$$

où μ_0 est la mobilité à champ nul, *E* est le champ électrique appliqué dans la couche, et β est le paramètre caractéristique de dépendance en champ électrique.

Ce modèle est lié à l'existence de pièges dans la couche organique. Lorsque l'on polarise le matériau, l'augmentation du champ électrique entraîne la libération des électrons piégés qui sont émis soit dans la bande de conduction, soit dans un piège voisin. Le modèle Pool-Frenkel a été largement étudié pour la modélisation de transport de charge dans les transistors organiques à effet de champ [117-119], les résultats expérimentaux montrent une variation de la mobilité avec le champ électrique latéral (c'est-à-dire le champ entre la source et le drain).

L'expression de Pool-Frenkel pour la simulation est donnée par la relation :

$$\mu_p = \mu_{po} \exp\left(\frac{-\Delta E_a + \beta \sqrt{E}}{K_B T}\right) \tag{III.5}$$

où ΔE_a est l'énergie d'activation sans champ, c'est-à-dire la hauteur moyenne qu'un porteur doit franchir pour passer d'un site à un autre, dont la valeur est rapportée par de nombreux chercheurs se situer autour de 5 à 50 meV, et β est le Poole-Frenkel constant, avec une valeur d'environ 1×10^{-5} - 5×10^{-4} eV (V/cm)^{0.5} pour pentacène [120], μ_{p0} est la mobilité sans champ, k_B la constante de Boltzmann et *T* la température exprimée en Kelvin. En fonction de la taille des grains de pentacène dans le canal, μ_0 allant de 1 cm²/V.s jusqu'à 10⁻³ cm²/V.s ont été rapportées [121]. La majeur partie de ces paramètres peuvent être trouvés dans la littérature. Nous résumons dans le tableau III.3 les valeurs numériques des paramètres utilisés pour la simulation. Les nouveaux paramètres cités précédemment permettant d'obtenir les caractéristiques de sortie et de transfert présentées dans la figure III.7.

Paramètre	Valeur	Référence
Densité caractéristique des pièges profonds (cm ⁻³ eV ⁻¹)	$2x10^{12}$	[62]
Niveau d'énergie (eV)	0.52	[02]
Température caractéristique (K)	300	/
$\mu_{p0} (cm^2/V.s)$	0.6	[122]
$\Delta E_a (eV)$	0.018	[68]
$\beta (eV(V/cm)^{0.5})$	7.7×10^{-5}	[68]

Tableau III.3 : Principaux paramètres utilisés pour la simulation



(b)

Figure III.7 : Comparaison des résultats expérimentale (triangle) et ATLAS de Silvaco d'après les paramètres utilisés dans le tableau III.3 : (a) caractéristiques de sortie, b) caractéristiques de transfert.

D'après la Figure III.7, une amélioration remarquable par rapport à les courbes obtenues dans la figure III.5, Cette amélioration pris en compte les densités de pièges et le modèle de type Poole-Frenkel, mais il reste toujours un décalage entres les caractéristiques électrique expérimentales et simulées. Pour une étude comparative plus poussée, il est nécessaire d'introduire d'autres paramètres plus spécifiques notamment par exemple la charge d'interface (l'interface isolant/SCO). Le décalage entre les courbes expérimentales et simulées pourrait d'abord être attribuée à la différence des tensions de seuil mesurées et celles extraites à partir des courbes simulées.



Figure III.8 : Caractéristique de transfert d'un OFET en fonction de ladensité de charge d'interface

La figure III.8 montre des caractéristiques I-V pour différentes densités de charge d'interface (N_{it}) à Vds= - 0.1V. On constate qu'une densité de charges ~ 10^{12} cm⁻² permet de faire parfaitement correspondre en régime linéaire la caractéristique expérimentale du transistor. Nous remarquons ainsi que l'impact de la charge d'interface se traduit par une augmentation de la tension de seuil V_T (décalage vers les valeurs plus négatives) et une dégradation du courant I_d .

Dans la figure III.8 les simulations ont été effectuées pour N_{it} entre 10^{13} et 10^9 , mais cette fois avec une densité de charge d'interface de $7x10^{11}$ qui permet de faire parfaitement correspondre en régime linéaire et saturation la caractéristique expérimentale du transistor comme illustré sur la figure III.9.

Comme nous remarquons sur la figure III.9, les caractéristiques simulées correspondent très bien à celles mesurées. Les options de modélisation choisies semblent donc donner des résultats satisfaisants. Ainsi, la distribution discrète des pièges et l'utilisation de mobilités de type Poole-Frenkel permettent d'obtenir une concordance avec les courbes I-V expérimentales.



Figure III.9 : Comparaison des résultats expérimentale et ATLAS de Silvaco : (a) caractéristiques de transfert, b) caractéristiques de sortie, c) Transconductance.

Après avoir trouvé un jeu de paramètres permettant de décrire les courbes I-V expérimentales, nous pouvons obtenir des résultats fournis par le simulateur comme le profil du champ électrique, potentiel, et la distribution des concentrations des porteurs de charge.

III.5 Profil du champ électrique et du potentiel

La figure III.10 présente le profil de flux du courant pour la structure TCBG d'un OFET en régime de saturation ($V_{gs} = V_{ds} = -3V$). Le transport de charges a lieu dans les premières monocouches de la couche de Pentacène, à l'interface avec Al₂O₃ le diélectrique de grille. Aussi, le profil typique du champ électrique dans la structure étudiée pour une tension de $V_{gs} = V_{ds} = -3V$ est représenté dans figure III.11. La différence de potentiel entre V_S et V_D crée une répartition de potentiels variables entre ces deux électrodes et la densité de charges n'est plus homogène dans tout le canal (diminue depuis la source jusqu'au drain), une zone de déplétion se crée à proximité du drain c'est le régime de saturation du transistor.



Figure III.10 : flux du courant d'un transistor OFET (L=10 µm et W=100µm).



Figure III.11 : profil typique du champ électrique longitudinal dans la structure étudiée ($V_{gs} = V_{ds} = -3V$), 1 nm au-dessus de l'interface du Pentacène / Al_2O_3 .

Le profil de potentiel de surface et la distribution de l'énergie dans la bande de conduction et de valence (gap = 2.8 eV), 1 nm au-dessus de l'interface du Pentacène / Al_2O_3 sont représentés dans la figure III.12. Les chutes de potentiel aux interfaces métal/organiques sont dues au potentiel de diffusion V_{bi} causé par l'alignement des niveaux de Fermi lors de la mise en contact [123].





Figure III.12 : a) profil typique du potentiel dans la structure étudiée ($V_{gs} = V_{ds} = -3V$), b) La distribution de l'énergie dans la bande de conduction et de valence.

III.6 Distribution de la concentration des porteurs de charge

La figure III.13 représente le profil de concentration des porteurs de charge (les trous dans notre cas) en échelle logarithmique, dans le régime linéaire ($V_{ds} = -0.5$ V) on a une accumulation des trous homogène dans tout le canal (figure III.13 a). De plus, on n'observe

également dans le régime de saturation ($V_{ds} = -3 V$) que la concentration des trous devient faible du côté du drain due à la zone de déplétion.



Figure III.13 : Profil de la concentration des trous dans la structure étudiée en échelle logarithmique: a) régime linéaire ($V_{gs} = -3V$ et $V_{ds} = -0.5V$), b) régime de saturation ($V_{gs} = V_{ds} = -3V$)

Dans le tableau III.4 nous présentons les valeurs des paramètres extraites par ATLAS, nos résultats sont comparés à des résultats expérimentaux.

L'accord entre la simulation et l'expérimentation nous autorise à dire qu'il est maintenant temps de faire confiance à la simulation pour les composants organiques et que les modèles sont pour la plupart parfaitement adaptés.

Paramètre	ATLAS	Expérimental
Tension de seuil, V_{Th} [V] (V _{ds} =-1.5V)	-1.112	-1.2
Tension sous le seuil, S [mV/dec] (V _{ds} =-1.5V)	82.9	100
Transconductance, $g_m [\mu s]$ ($V_{gs} = V_{ds} = -3V$)	4.73	4.5
Mobilité, μ_{lin} [cm ² /V.s] (V _{gs} = -0.1V, V _{ds} =-1.5V)	0.362	/
Mobilité, μ_{sat} [cm ² /V.s] (V _{gs} = -2.5V, V _{ds} =-1.5V)	0.53	0.4
$I_{ds,max}$ [µA] à $V_{gs} = V_{ds} = -3V$	- 4.96	- 5
$I_{ds,Min}$ [pA] à $V_{gs} = 0$ V	-0.114	- 0.5
Rapport I _{on} / I _{off}	4.35×10^7	10 ⁷

Tableau III.4 : Comparaison entre les paramètres obtenus par la simulation ATLAS et le	S
paramètres expérimentaux	

III.7 Caractéristiques de transfert en fonction de la longueur du canal

On a représenté sur la figure III.14 les caractéristiques de transfert en fonction de la longueur du canal en ayant ajustés les paramètres.



Figure III.14 : Caractéristique de transfert en fonction de la longueur du canal d'un OFET.

Nous remarquons une différence entre les courbes expérimentales et les courbes simulés, le courant drain dans ce cas est donc inférieur à celles mesurées mais reste comparable. Cette différence peut provenir de l'effet de la résistance de contact et la rugosité de surface qui ne peuvent être inclus dans le logiciel de simulation facilement. Cependant, cette différence de courant peut avoir des conséquences sur la tension de seuil et le rapport I_{on}/I_{off} . Une telle valeur du courant est synonyme d'un mauvais transport de charges dans la couche de pentacène.

Les transistors organiques souffrent de grandes résistances de contact, et parfois elles sont à la source de la limitation des performances. Si, la résistance totale du dispositif est R_{On}, R_C étant la résistance de contact et R_{Ch} la résistance du canal, on peut écrire : R_{On} = R_C + R_{Ch} avec R_C = R_{source} + R_{drain}

La vitesse de commutation des circuits intégrés organiques peut être estimée à partir des performances des transistors individuels et est approximativement proportionnelle à (μ_{FET} / L^2) [124]. Pour atteindre de grandes vitesses de commutation on cherche à bien sûr augmenter μ , mais aussi à diminuer *L*. Le fait de diminuer la longueur du canal permet aussi d'avoir de plus grands courants de sortie. Cependant, bien que R_C soit indépendant de la longueur de canal (*L*), R_{Ch} est proportionnelle à *L*.

Ce modèle est utile pour des ajustements de courbes précis entre des données expérimentales et simulées. L'interprétation proposée est l'amélioration de la mobilité pour les structures ayant des longueurs de canal supérieur à 20 μ m. Comme il est mentionné plus haut, en fonction de la taille des grains de pentacène dans le canal, μ_0 allant de 1 cm²/V.s jusqu'à 10⁻³ cm²/V.s ont été rapportées dans la littérature. Les différentes valeurs de μ_0 utilisés dans la simulation sont rassemblées dans le tableau III.5.

$\mu_0 \text{ cm}^2/\text{V.s}$	L (µm)
0.72	20
0.77	25
0.80	30
0.85	40
0.9	50

Tableau III. 5 μ_0 pour différents longueurs de canal



Figure III.15 : Caractéristique de : a) transfert, b) sortie en fonction de la longueur de canal d'un OFET

La figure III.15 montre une comparaison entre les résultats simulés par le modèle ATLAS des différentes caractéristiques I-V (I_{ds} - V_{ds} et I_{ds} - V_{gs}) avec les caractéristiques électriques expérimentales pour différentes longueurs de canal [125]. Les paramètres de simulations utilisés donnent une bonne approximation du courant de drain pour l'ensemble des longueurs de canal considérées.

III.8 Conclusion

Ce chapitre est consacré à la modélisation des transistors organique à partir de logiciels commerciaux. Nous avons utilisé ici le logiciel commercial ATLAS de Silvaco comme outil de simulation ; celui ci est très connu dans le domaine de la simulation numérique. Les options choisies pour la modélisation et le jeu de paramètres déterminé pour la couche de pentacène permettent de reproduire les caractéristiques I-V d'un transistor

organique à effet de champ. La modélisation rend aussi compte de l'effet de la longueur du canal sur les caractéristiques des transistors organiques, ainsi que de l'influence de la densité de pièges dans la couche active. Le bon accord entre les courbes issues de la simulation et les courbes expérimentales valide la démarche adoptée pour la modélisation numérique. Le but est de montrer qu'il est possible de valider par la simulation les résultats compilés sur les propriétés électriques du pentacène et des transistors à base de pentacène.

L'accord entre la simulation et l'expérimentation nous autorise à dire qu'il est maintenant temps de faire confiance à la simulation pour les composants organiques et que les modèles sont pour la plupart parfaitement adaptés. Nous avons également montré le potentiel des simulations 2D pour étudier des transistors organiques à effet de champ. Ainsi, à travers toute l'étude, nous avons fait un effort pour garder un bon équilibre entre la théorie et les expériences.

CHAPITRE IV

MODELE COMPACT ET EXTRACTION DES PARAMETRES

IV.1 Introduction

L'essor de l'électronique organique a souvent été guidé par l'élaboration de nouveaux matériaux ou l'adaptation de matériaux connus pour la réalisation de composants électroniques. Cependant l'amélioration de ces composants passe forcément par la connaissance et la maîtrise de la structure des composants en eux même et de leur principe de fonctionnement. Ainsi, la microélectronique joue un rôle important dans l'optimisation des composants et dans la modélisation de leur fonctionnement.

En électronique, la simulation numérique consiste à utiliser un ordinateur pour prévoir le fonctionnement d'un circuit avant sa réalisation, d'évaluer ses performances mais aussi ses limites. La difficulté se trouve dans la description des composants par modèle physique et mathématique précis. La simulation numérique est en fait une adaptation de la modélisation mathématique aux moyens informatiques. La modélisation comportementale ou compacte, qui consiste à décrire uniquement la relation entre les entrées et les sorties (par exemples, les tensions appliquées comme l'entrée et le courant comme la sortie) à travers une série d'équations simples avec des paramètres physiques ou mathématiques. Le Rensselaer Polytechnic Institute (RPI) a développé plusieurs modèles compacts pour des différents composants microélectroniques, dont plus particulièrement les TFT en silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H TFTs), également classiquement appelé « universal a-Si:H TFT model » [126-128]. Le modèle a été utilisé pour les TFTs inorganiques et organiques, y compris les caractéristiques spécifiques pour chaque cas [129-131]. Un comportement similaire dans la caractéristique courant-tension et d'autres caractéristiques entre un OFET et a-Si: H TFT ou MOSFET a permis de modifier les modèles existants pour les transistors a-Si: H TFT ou MOSFET afin de représenter les caractéristiques d'un OFET [31, 132-133].

Dans ce chapitre, nous expliquons les équations du courant qui est proposées originalement pour a-Si:H TFT. Ensuite, nous présentons des modifications de ce modèle pour la simulation des OFETs. Nous allons d'abord présenter le modèle analytique utilisé pour simuler le fonctionnement d'un transistor à base de semi conducteur organique. L'objectif principal est de décrire une expression analytique unique qui couvre tous les régimes de fonctionnement d'OFET. Puis nous présenterons les résultats d'extraction des différents paramètres électriques basés sur les algorithmes génétiques à partir des données expérimentales. Les résultats ont pu être validés par la confrontation avec des caractéristiques expérimentales issues de la littérature. Le but principal de l'utilisation des résultats

89

expérimentaux est à comparer avec notre modèle pour confirmer sa validité.

IV.2 Description du modèle OFET

Ce modèle est basé sur une approche d'interpolation utilisé pour obtenir le comportement souhaité de la région sous-seuil vers la région au-dessus du seuil, autrement dit la continuité entre le régime au-dessus du seuil et le régime sous le seuil est assurée par une fonction mathématique en vue d'une transition qui n'est pas abrupte entre les deux régimes.

Ce modèle modélise le courant de drain grâce à la description de trois régimes de fonctionnement : de fuite, sous le seuil et au-dessus du seuil, et nous commençons la description du modèle par le régime au-dessus du seuil.

IV.2.1 Régime au-dessus du seuil

Un transistor organique fonctionne en régime d'accumulation, la dépendance du courant dans le régime au-dessus du seuil I_{abv} en conductance du canal g_{ch} est donnée par l'équation suivante [134, 135]:

$$I_{abv} = g_{ch} V_{dse} (1 + \lambda V_{ds}) \tag{IV.1}$$

Dans cette expression, V_{dse} et λ indiquent respectivement la tension de drain effective et le paramètre de modulation de longueur de canal. Si on prend en compte les résistances de contact drain (R_D) et source (R_s), la conductance du canal g_{ch} est donnée par

$$g_{ch} = \frac{g_{chi}}{1 + R_c g_{chi}} \tag{IV.2}$$

où R_c est la résistance de contact $R_{contact} = R_{source} + R_{drain}$ et g_{chi} est la conductance intrinsèque du canal.

En utilisant les dimensions physiques du dispositif, la largeur (*W*) et la longueur (*L*), la capacité par unité de surface de l'isolant (*C_i*) et la mobilité effective dans un OFET, notée μ_{FET} , aussi appelée « field-effect mobility », nous trouvons l'expression de la conductance intrinsèque du canal en régime au-dessus du seuil.

$$g_{chi} = -\mu_{FET} K \left(V_{gs} - \lambda V_{Th} \right) \tag{IV.3}$$

où

$$k = \frac{W}{L} C_i \tag{IV.4}$$

Contrairement aux dispositifs cristallins, la mobilité effective μ_{FET} dans un OFET présente une dépendance avec la tension de grille V_{gs} [129]. Le modèle propose d'écrire la mobilité effective comme une fonction de V_{gs} , sous la forme de la loi de puissance avec trois paramètres : la tension de seuil V_{Th} , γ et V_{aa} .

$$\mu_{FET} = \mu_0 \left(\frac{\left| V_{gs} - V_{Th} \right|}{V_{aa}} \right)^{\gamma}$$
(IV. 5)

où µ0 est la mobilité dans la bande d'énergie, qui est une propriété intrinsèque du SCO,

 V_{aa} est la tension de renforcement de la mobilité, son rôle est pour ajuster μ_{FET} à la valeur expérimentale de la mobilité à champ faible du dispositif à modéliser, et γ est l'exposant caractéristique de mobilité. Le paramètre γ utilisé pour décrire le comportement de la mobilité. A noter, les équations (IV.3) et (IV.5) sont écrites pour un modèle d'OFET de type P, où $V_{gs} - V_{Th} < 0$ dans le régime au-dessus du seuil.

L'équation (IV.2) de la conductance du canal g_{ch} est réécrite comme ci-dessous, en utilisant l'équation (IV.3)

$$g_{ch} = \frac{-K\mu_{FET}(V_{gs} - V_{Th})}{1 - R_c K\mu_{FET}(V_{gs} - V_{Th})}$$
(IV. 6)

La dépendance de la tension V_{dse} en paramètre *m* qui traduit l'acuité de la transition entre le mode linéaire et le mode saturé [129], est donnée par l'équation suivante :

$$V_{dse} = V_{ds} \left[1 + \left(\frac{V_{ds}}{V_{sat}}\right)^m \right]^{-\left(\frac{1}{m}\right)}$$
(IV. 7)

où V_{sat} est la tension de saturation. Nous observons dans l'expression (IV.7) que, pour des petites valeurs de V_{ds} ($|V_{ds}| \ll |V_{sat}|$), V_{dse} est très proche de V_{ds} ; et pour des grandes valeurs de V_{ds} ($|V_{ds}| \gg |V_{sat}|$), V_{dse} tend vers V_{sat} . Avec

$$V_{sat} = \alpha_{sat} \left(V_{gs} - V_{Th} \right) \tag{IV.8}$$

Le paramètre α_{sat} détermine la tension de saturation.

Le courant I_{abv} dans le régime au-dessus du seuil pour les deux régions linéaires et saturation s'obtient simplement en remplaçant g_{ch} par (IV.6), V_{dse} par (IV.7), et V_{sat} par (IV.8) dans (IV.1), ce qui donne :

$$I_{abv} = \frac{-K\mu_{FET}(V_{gs} - V_{Th})}{1 - R_c K\mu_{FET}(V_{gs} - V_{Th})} V_{ds}(1 + \lambda |V_{ds}|) \left[1 + \left(\frac{V_{ds}}{V_{sat}}\right)^m\right]^{-(1/m)}$$
(IV.9)

Le modèle prédit correctement la continuité de changement du courant pour les deux signes de tension drain-source, pour cette raison, la valeur absolue de V_{ds} est ajouté à l'équation (IV.9) (Ce point sera présenté par la suite sur la Figure IV.5).

IV.2.2 Régime sous le seuil

Dans le régime sous-seuil, où la tension de grille est inférieure à la tension de seuil, le courant de drain I_{sub} sous le seuil d'un transistor OFETs est basé sur la théorie d'un transistor MOSFET, qui tient compte que la conduction sous le seuil considérer comme un courant de diffusion [136]. Le gradient de concentration de porteurs de charges entre les régions de contact source et drain, est un des raisons pour laquelle un courant de diffusion circule dans le canal qui est indépendant de la tension de drain.

Le courant sous le seuil dépend exponentiellement de la tension V_{gs} sous la forme

$$I_{sub(a)} = I_0 exp\left(-\frac{q(V_{gs} - V_{on})}{nK_BT}\right)$$
(IV. 10)

où

$$n = \frac{Sq}{K_B T ln(10)} \tag{IV.11}$$

 k_B la constante de Boltzmann, I_0 est le courant off (l'état Off courants lorsque la tension de grille $V_{gs} = 0$ V), et V_{on} est la tension de déclenchement « switch-on », comme nous l'avons déjà indiqué dans le chapitre 1 (la section de la tension de seuil).

La pente sous le seuil indique la vitesse à laquelle le transistor passe de l'état bloquant (off) à l'état passant (on). Sa valeur correspond à l'inverse de la pente d'une zone située entre la tension V_{on} et V_{Th} dans les courbes de transfert sous forme logarithmique, elle s'exprimera donc en V/décade [79], S est donnée par

$$S = \frac{\partial V_{gs}}{\partial (\log_{10} I_d)} = \frac{K_B T}{q} ln(10) \left[1 + \frac{q}{C_i} \left(\sqrt{\varepsilon_{sc} N_{bulk}} + q N_{int} \right) \right]$$
(IV. 12)

où C_i est la capacité du diélectrique de grille par unité de surface, q est la charge élémentaire. L'équation (IV.12) montre les contributions des défauts volumiques et d'interfaces sur la pente sous le seuil, où N_{bulk} est la densité d'états dans le volume du semi conducteur et ε_{sc} sa permittivité.

Cependant il est difficile d'extraire N_{bulk} et N_{int} de la simple analyse de *S* seule, et donc d'autres méthodes d'analyses sont nécessaires pour les déterminer. Pour simplifier l'étude nous négligerons l'influence de la densité de défauts dans le volume sur la pente sous seuil et sa valeur extraite sera simplement due à la densité d'états d'interfaces entre l'isolant et le semi conducteur organique. Ce qui réduit l'équation IV.12 à

$$S = \frac{K_B T}{q} \ln(10) \left[1 + \frac{q^2 N_{int}}{C_i} \right]$$
 (IV. 13)

A partir de la détermination de la pente sous seuil, nous pouvons accéder à la densité d'états d'interfaces N_{int} (cm⁻².eV⁻¹) :

$$N_{int} = \frac{C_i}{q^2} \left(\frac{Sq}{K_B T ln(10)} - 1 \right)$$
 (IV. 14)

Ainsi une pente sous le seuil élevée sera l'indication d'un nombre de pièges important.

Les transistors organiques ont un courant de fuite (correspond à l'état éteint) à travers l'isolant de grille, le courant sous-seuil est composé de deux contributions dans le régime sous de seuil (courant de fuite noté I_0 , et le modèle du courant de drain $I_{sub(a)}$ sous le seuil). Donc le courant est écrit comme suivant :

$$I_{sub} = I_0 + I_{sub(a)} = I_0 \left(1 + exp\left(-\frac{q(V_{gs} - V_{on})}{nK_BT} \right) \right)$$
(IV. 15)

Nous obtenons alors une nouvelle expression pour le courant sous le seuil.

IV.2.3 Modèle complet

Comme on a pu le voir précédemment, les deux modèles du courant I_{abv} et I_{sub} peuvent décrire seulement leur régime correspondant. Une méthode traditionnelle utilisée pour les TFT en silicium est de prendre $[(1/I_{abv}) + (1/I_{sub})]^{-1}$ comme une équation combinée [137], ce qui n'est pas compatible avec l'applicabilité générale à OFETs.
Une approche qui est très facile à mettre en œuvre est l'utilisation de la fonction tangente hyperbolique (*tanh*) comme une méthode appropriée pour OFET en vue d'une transition qui n'est pas abrupte entre les deux régimes. L'objectif principal est de décrire une expression analytique unique qui couvre tous les régimes de fonctionnement d'OFET.

Le courant de drain en englobant tous régimes, c'est-à-dire au-dessus et au-dessous de la tension de seuil, alors le courant totale I_T est exprimé comme suivant :

$$I_T = I_{abv} \cdot 0.5 \cdot \left[1 - tanh\left(\frac{V_{gs} - V_{tr}}{S_l}\right)\right] + I_{sub} \cdot 0.5 \cdot \left[1 + tanh\left(\frac{V_{gs} - V_{tr}}{S_l}\right)\right]$$
(IV. 16)

Le paramètre V_{tr} utilisé pour définir le point de transition (la zone d'intersection entre les deux régimes) et S_l pour le niveau de transition abrupte. Ce dernier est ajusté avec le paramètre S_l par des calcules itératifs et la comparaison à des données expérimentales.

Ce modèle reste valable même les deux courants I_{abv} et I_{sub} ne sont pas croisés (Ce point sera présenté par la suite sur les Figures IV.2(a) et (b)). La fonction de transition peut remplir l'espace entre I_{abv} et I_{sub} , et V_{tr} est décalée dès V_{Th} par quelques volts vers la zone audessus du seuil pour atteindre une transition suffisamment lisse entre les deux régimes.

IV.3 Extraction des paramètres

La méthode UMEM (*Unified Model and parameter Extraction Method*) est un instrument permettant l'extraction complète des paramètres, qui a été développé et appliqué à différents transistor à couche mince (TFT) au cours des dernières années [129, 134], mais il s'applique également sur les transistors organiques [138]. Cette méthode dépend de base purement mathématique et serait généralement prendre plus de temps, avec une expertise humaine pour interpréter les résultats. Pour contourner ces difficultés, nous proposons une méthode d'extraction de paramètres basée sur les algorithmes génétiques (AG) pour le modèle précédent d'OFET.

L'essor de l'évolution artificielle, depuis les années 80, peut s'expliquer par deux phénomènes concurrents. Premièrement, cet essor est principalement dû à l'accroissement exponentiel des moyens de calculs mis à la disposition des chercheurs, ce qui leur permet d'afficher des résultats expérimentaux pertinents et prometteurs. Le deuxième point est l'abandon du biologiquement plausible. Les algorithmes évolutionnaires constituent une approche originale : il ne s'agit pas de trouver une solution analytique exacte, ou une bonne approximation numérique, mais de trouver des solutions satisfaisant au mieux à différents

critères, souvent contradictoires. S'ils ne permettent pas de trouver à coup sûr la solution optimale de l'espace de recherche, du moins peut-on constater que les solutions fournies sont généralement meilleures que celles obtenues par des méthodes plus classiques, pour un même temps de calcul.

Un algorithme génétique recherche le ou les extrema d'une fonction définie sur un espace de données. Pour l'utiliser, on doit disposer les cinq éléments suivants :

- Un principe de codage de l'élément de population. Cette étape associe à chacun des points de l'espace d'état une structure de données. Elle se place généralement après une phase de modélisation mathématique du problème traité.
- Un mécanisme de génération de la population initiale. Ce mécanisme doit être capable de produire une population d'individus non homogène qui servira de base pour les générations futures. Le choix de la population initiale est important car il peut rendre plus ou moins rapide la convergence vers l'optimum global.
- Une fonction à optimiser. Celle-ci retourne une valeur appelée fitness ou fonction d'évaluation de l'individu.
- Des opérateurs permettant de diversifier la population au cours des générations et d'explorer l'espace d'état. L'opérateur de croisement recompose les gènes d'individus existant dans la population, l'opérateur de mutation a pour but de garantir l'exploration de l'espace d'états.
- Des paramètres de dimensionnement : la taille de la population, nombre total de générations ou critère d'arrêt, probabilités d'application des opérateurs de croisement et de mutation.

Les algorithmes génétiques fournissent des solutions aux problèmes n'ayant pas de solutions calculables en temps raisonnable de façon analytique ou algorithmique. En effet, l'utilisation des algorithmes génétiques, ne requiert pas la connaissance de la nature du problème, il est seulement nécessaire de fournir une fonction permettant de coder une solution sous forme de gènes (et donc de faire le travail inverse) ainsi que de fournir une fonction permettant d'évaluer la pertinence d'une solution au problème donné. La figure IV.1 illustre le principe de fonctionnement d'un algorithme génétique.

Les algorithmes génétiques ont été largement reconnus par leur robustesse dans la résolution des problèmes difficiles et divers. La robustesse des AGs pour les transistors a été démontrée par nombreux chercheurs [139, 140]. Par rapport aux techniques conventionnelles existantes, les principaux avantages des AGs sont leur simplicité, la facilité d'utilisation, et

applicable à extraire les paramètres d'un transistor [141, 142].



Figure IV.1 : Schéma du principe des algorithmes génétiques.

Les paramètres du modèle analytique sont regroupés dans un vecteur appelé chromosome, ces paramètres sont optimisés par la minimisation de la fonction fitness en terme de qualité d'adaptation pour des données expérimentales.

Selon la caractéristique *I-V* pour le transistor OFET, il est important de trouver la meilleure configuration des paramètres pour ajuster les résultats simulés (modèle analytique d'OFET) en se basant sur les résultats expérimentaux. Les paramètres à ajuster peuvent être optimisés en tenant en compte la minimisation de l'erreur associée à l'optimisation.

La fonction fitness f (l'erreur moyenne quadratique RMS) utilisée pour l'évaluation des chromosomes et l'ajustement des paramètres est définie par:

$$f = \frac{1}{M} \sum_{V_{gs}} \sum_{V_{ds}} \left[\frac{I_{d,Exp} - I_{d,GA}}{I_{d,Exp}} \right]^2$$
(IV. 17)

où *M* représente la taille de la base de données de la trajectoire (les données expérimentales), *'EXP'* et *'GA'* indiquent les données expérimentales et les données calculées par la technique des AGs respectivement.

La différence entre les données expérimentales et les données calculées par la technique des AGs s'appelle l'erreur normalisée (l'erreur moyenne quadratique RMS), cette dernière est employée pour évaluer la déformation des courbes *I-V*. Notre objectif est de minimiser RMS afin d'obtenir la meilleure solution (meilleur chromosome) dans la population pour assurer l'exactitude et la précision de notre modèle analytique du courant de drain.

Les paramètres utilisés dans cette étude sont résumés dans le tableau IV.1 [143].

Les paramètres de AG	Valeurs
Nombre des variables	8
La taille de la population	100
Le nombre Maximum de générations	700
La sélection	Tournoi
Le croisement	Arithmetic
La mutation	Adaptive feasible
Fraction de croisement	0.8

Tableau IV.1: Paramètres de GA utilisés dans cette application.

IV.4 Résultats et discussions

Pour vérifier la validité de la méthode, nous nous sommes basés sur des données expérimentales correspondant à trois TFT organiques différents, et dont les caractéristiques technologiques sont résumés dans le tableau IV.2.

D'après les équations (IV.9), (IV.15), et (IV.16), le modèle compact d'OFET représente 12 paramètres. Pour plus de simplicité, nous avons seulement besoin d'extraire huit différents paramètres : V_{Th} , γ , V_{aa} , λ , m, R_c , α_{sat} , et S, les autres paramètres peuvent être calculés à partir des valeurs extraites. La densité d'états d'interfaces N_{int} est calculée à partir de l'équation (IV.14) à l'aide de la valeur extraite de S, nous obtenons, à partir de l'équation (IV.5) la valeur de la mobilité effective μ_{FET} avec trois paramètres : la tension de seuil V_{Th} , γ et V_{aa} , le point de transition V_{tr} mentionné précédemment est déterminé par le point d'intersection entre I_{abv} et I_{sub} , ou en minimisant la distance verticale entre les deux courants comme illustré sur la figure IV.2 (a) et (b).

Transistor	La couche active Diélectrie		Diélectrique	Diélectrique grille W [m		L [um]	Référence
	Туре	[nm]	Туре	[nm]	,, [huu]	L [µIII]	Reference
			AlOx	3.6			
T1	pentacène	30	+		100	10	[109]
			SAM	2.1			
			AlOx	3.6			
T2	DNTT	11	+		400	200	[144]
			SAM	1.7			
			PMAA	3.6			_
Τ3	pentacène	100	+ PEDOT:PSS	1.7	1000	40	[138]

Tableau IV.2: Paramètres de technologie des transistors organiques adoptés

Le tableau IV.3 résume les valeurs des paramètres (la tension de déclenchement V_{on} , courant de fuite noté I_0 , et la est la mobilité dans la bande d'énergie μ_0) utilisé dans la modélisation des trois types de transistors.

Tableau IV.3: Paramètres utilisés pour la simulation d'OFET [109, 144, 138]

Transistor	μ ₀ [cm ² /V.s]	I ₀ [pA]	V _{on} [V]
T1	1	-0.5	-0.5
T2	2.1	-1	-0.8
Т3	1	-66	-4.3

Le tableau IV.4 illustre les valeurs des paramètres extraits en utilisant les algorithmes génétiques, nos résultats sont comparés à des résultats expérimentaux [143].

	T	1	T	2	T	3
Paramètre	Valeur extraite	Expérimentale	Valeur extraite	Expérimentale	Valeur extraite	Expérimentale
V _{Th} [V]	-1.07	-1.2	-1.1	-1.04	-12.35	-12
γ	0.15		0.03		0.98	0.91
V _{aa} [V]	560		48		240	350
$\lambda [V^{-1}]$	-5.2×10 ⁻³		-7×10 ⁻³		-3×10 ⁻³	-1.2×10 ⁻³
m	2.97		2.7		1.2	1.8
$R_c [K\Omega]$	55	85	6.2	5	19.2	24
α_{sat}	0.6		0.55		0.48	0.46
S [V/dec]	0.16	0.1	0.1	0.078	3.7	4.1
N _{int} [cm ⁻²]	7.38×10 ¹²	3×10 ¹²	2.375×10^{12}	1.1×10^{12}	1.26×10^{12}	1.4×10^{12}
$V_{tr}\left[V ight]$	-1.25		-1.2		-14	-15
$S_1[V]$	0.07		0.06		2.7	2.77
μ _{FET} [cm ² /V.s] (Vgs max)	0.42 (Vgs=-3V)	0.4	1.9 (Vgs=-3V)	2	0.16 (Vgs=-50V)	0.13

Tableau IV.4 : Paramètres extraits en utilisant la méthode GA avec les données expérimentales [143]

-- : La valeur n'est pas disponible dans la référence.

La figure IV.2 présente la région de transition entre les deux régimes (au-dessus du seuil (I_{abv}) et le régime sous le seuil (I_{sub})) en échelle logarithmique pour les transistors T1 et T3 respectivement, V_{tr} est le point de transition (la zone d'intersection entre les deux régimes), I_0 est le courant off et V_{on} est la tension de déclenchement (notée V_0). Chaque courant traduire son régime de fonctionnement.



(b)

Figure IV.2 : Région de transition entre le régime au-dessus du seuil (I_{abv}) et le régime sous le seuil (I_{sub}) pour le cas : a) intersection entre les deux courants I_{abv} et I_{sub} , b) les courants I_{abv} et I_{sub} ne sont pas croisés.

La continuité entre le régime au-dessus du seuil et le régime sous le seuil est assurée par une fonction tangente hyperbolique (*tanh*) en vue d'une transition qui n'est pas abrupte entre les deux régimes. Le paramètre S_l utilisé pour définir le niveau de transition pour le modèle complet, des calcules itératifs et comparaison à des données expérimentales sont représentés à la figure IV.3.



Figure IV.3 : Effet du paramètre S₁ sur le modèle complet.

La figure IV.3 montre qu'un très bon accord entre les résultats expérimentales et ceux obtenus par notre modèle pour $S_l = 0.07$ V [143].

Une comparaison des caractéristiques de transfert et de sortie entre les résultats expérimentales et les résultats simulés a été représentée sur les figures IV.4 et IV.5 respectivement pour les trois transistors. Les figures IV.4 (a), (b) et (c) présentent les caractéristiques de transfert en échelle logarithmique pour les transistors T1, T2 et T3 respectivement. Nous avons validée notre modèle par des comparaisons avec des mesures expérimentales dans le régime linéaire et le régime de saturation (T2 et T3).



Figure IV.4 : Comparaison des caractéristiques de transfert entre les résultats expérimentales et nos résultats de simulation pour : a) T1; b) T2; c) T3.



Figure IV.5 : Comparaison des caractéristiques de sortie entre les résultats expérimentales et nos résultats de simulation pour : a) T1; b) T2; c) T3.

On peut voir clairement sur les figures IV.4 et IV.5, que nos résultats pour les caractéristiques de transfert et de sortie sont en accord avec des résultats expérimentaux. Nous remarquons que dans les trois cas, le modèle offre des résultats satisfaisants pour toute la gamme de simulation, il rend un bon comportement dans toutes les régions de fonctionnement. Les résultats du modèle sont très satisfaisants dans toutes les courbes, puisque la simulation reproduit très bien les variations du courant drain.

Un bon accord est observé pour toutes les courbes et les meilleures valeurs de la fonction fitness sont 0.2183 pour T1, 0.1573 pour T2, et 0.017 pour T3. Ce résultat est obtenu pour une base de données composée de 70000 éléments dans à peu près 30 minutes pour chaque échantillon (trois échantillons de transistor), en utilisant *Windows XP* avec un *Pentium IV* (2.7 GHz) avec une *RAM* (2GB), dans l'environnement *MATLAB 7.2*. La figure IV.6 montre le comportement de convergence vers la solution optimale (l'évolution de la fonction fitness) au fur et à mesure des générations pour les courbes multiple I-V décrites auparavant [143].





Figure IV.6 : Evolution de la fonction fitness en fonction du nombre de générations pour: a) T1; b) T2; c) T3.

Pour étudier le comportement de convergence de l'algorithme proposé, nous avons effectué trois séries d'expériences indépendantes pour ajuster les six courbes I-V décrites précédemment, qui sépare les courbes I-V en deux, en attribuant pour chaque série une courbe à la caractéristique de transfert et l'autre au caractéristique de sortie. Si la valeur de la fonction fitness reste constante pendant environ 200 itérations, l'algorithme arrête l'exécution et la meilleure valeur est affichée (Critère d'arrêt). Grâce à cette technique, une valeur minimum de la fonction fitness est atteinte entre 500-700 itérations pour T1, T2 et T3, respectivement [143].

La mobilité effective μ_{FET} extraite pour le transistor T1 est égale à 0.42 cm²/V.s , 1.9 cm²/V.s pour T2, et 0.16 cm²/V.s pour T3 avec une valeur maximale de la tension grillesource. Comme on peut le voir sur la figure IV.7, le comportement de la mobilité pour les transistors T1, T2 et T3 augmente avec V_{gs}, qui est définie par l'équation IV.5. La dépendance de la mobilité avec V_{gs} est similaire à celle observée pour les transistors en silicium amorphe (a-Si: H).

Les potentiels du modèle ont été illustrés à travers des simulations de caractéristiques courant-tension et de comportement de la mobilité effective dans tous les régimes. Ce résultat nous permet de montrer l'efficacité du modèle proposée dans ce travail.



Figure IV.7 : Comportement de la mobilité pour les transistors: a) T1, b) T2, c) T3.

Notre objectif est la modélisation du comportement électrique des OFET, nous expliquons les équations du courant qui est proposées originalement pour a-Si:H TFT afin de développer notre modèle analytique d'OFET.

IV.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un modèle analytique capable de simuler les caractéristiques courant-tension d'un transistor OFET. Il n'est pas difficile de proposer une expression empirique en regardant les résultats des simulations, nous nous sommes basés pour cela sur le côté théorique pour trouver une expression générale et puis l'adapter dans une formulation compacte.

Notre objectif est la modélisation du comportement électrique des OFET, nous avons fait appel aux équations du courant qui sont proposées originalement pour a-Si:H TFT afin de développer notre modèle analytique d'OFET. L'objectif principal est de décrire une expression analytique unique qui couvre tous les régimes de fonctionnement d'OFET. Nous avons montré aussi l'applicabilité de GA pour l'extraction des paramètres d'un transistor organique, puis nous avons validée notre approche par des comparaisons avec des mesures expérimentales, cette comparaison montre clairement que les paramètres extraits à partir des simulations du comportement des trois transistors décrivent le comportement souhaité du OFET, ce qui semble en accord avec des résultats publiés dans la littérature.

CHAPITRE V

MODELISATION DU TRANSISTOR ORGANIQUE PAR LES TECHNIQUES D'INTELLIGENCE ARTIFICIELLE

V.1 Introduction

Les techniques de l'intelligence artificielle sont de plus en plus employées dans le développement des systèmes dit intelligents. Ces techniques sont utilisées pour élaborer des applications dans de nombreux domaines. Nous remarquons que les méthodes dites intelligentes comme les réseaux de neurones, la logique floue, les algorithmes génétiques et leurs hybridations ont été largement utilisés dans la littérature et en particulier dans le domaine électronique. Dans ce chapitre, nous présenterons le principe des techniques de l'intelligence artificielle et leurs applications dans le domaine de la modélisation et la simulation des transistors organiques.

V.2 Réseaux de neurones artificiels

Un réseau de neurone artificiel (noté ANN Artificial Neural Network) est un modèle composé d'éléments simples (neurones) inspirés par le système nerveux biologique. Les ANNs pour les différencier des réseaux de neurones biologiques, sont composés de neurones artificiels simples, petites fonctions mathématiques, qui permettent, montés en réseau de former des fonctions complexes très utiles. Le fonctionnement du réseau (de neurone) est fortement influencé par la connections des éléments entre eux qui peut être entraîné en ajustant les valeurs des connections (ou poids) entre les éléments (neurone).

Un neurone artificiel, qu'il soit émulé d'une manière logicielle ou implanté matériellement, comprend les éléments suivants (Figure V.1):

- L'ensemble des connexions permettant la réception des signaux d'entrée et la transmission du signal de sortie,
- L'additionneur qui réalise la somme des signaux d'entrée pondérés,
- La fonction d'activation (fonction de transfert) qui est une fonction non-linéaire de saturation servant à limiter l'amplitude du signal de sortie du neurone.

La sortie n est donnée par l'équation suivante :

$$n = \sum_{i=1}^{R} w_{1,i} p_i = w_{1,1} p_1 + w_{1,2} p_2 + \dots + w_{1,R} p_R - b$$
(V.1)

Cette sortie correspond à une somme pondérée des poids W et des entrées P moins ce qu'on nomme le biais b du neurone. Le résultat n de la somme pondérée s'appelle le niveau d'activation du neurone. Le biais b s'appelle aussi le seuil d'activation du neurone. Lorsque le niveau d'activation atteint ou dépasse le seuil *b*, alors l'argument de *f* devient positif (ou nul). Si non, il est négatif.



Figure V.1 : Modèle d'un neurone artificiel [145].

Les Réseaux de Neurones est en fait un modèle de comportement universel dans la mesure où il n'est plus nécessaire de faire d'hypothèse mathématique initiale. Seule la structure du réseau peut changer (nombre et taille des couches intermédiaires, fonctions de transfert).

V.2.1 Architecture du réseau de neurones

Un réseau de neurones est un maillage de plusieurs neurones, généralement organisé en couches (couche d'entrée, couche de sortie). Les neurones sont des éléments computationnels interconnectés et organisés selon une architecture figée, il existe plusieurs types d'architectures. L'information donnée au réseau va donc se propager couche par couche, de la couche d'entrée à la couche de sortie, en passant soit par aucune, une ou plusieurs couches intermédiaires dites couches cachées.

Les réseaux de neurones multicouches sont habituellement bâtis selon le modèle « normalisé » et comprennent 3 ou 4 couches en tout (donc 1 ou 2 couches cachées). S'il est théoriquement possible de construire des réseaux avec un très grand nombre de couches cachées, les réseaux comprenant plus de couches cachées sont très rares, étant donné que chaque nouvelle couche augmente la quantité de calculs d'une manière exponentielle. La plupart des réseaux de neurones multicouches sont, dans la pratique, des perceptrons multicouches (noté MLP Multi Layer Perceptron). C'est ce type de configuration que nous utiliserons pour établir notre modèle neuronale [146].

Dans la figure V.2 est montré l'exemple d'un réseau MLP à deux couches cachées (réseau 2-4-5-1).



Figure V.2 : Modèle d'un neurone artificiel.

Pour le réseau MLP, chaque neurone dans une couche est connecté à tous les neurones de la couche précédente et de la couche suivante (excepté pour les couches d'entrée et de sortie) et il n'y a pas de connexions entre les cellules d'une même couche. Les fonctions d'activation utilisées dans ce type de réseaux sont principalement les fonctions à seuil ou sigmoïdes.

V.2.2 Apprentissage des réseaux de neurones artificiels

L'apprentissage est l'étape essentielle dans un Réseau de neurone. Lors de l'apprentissage (modification des poids des connexions), on cherche à minimiser une erreur, sur la base d'apprentissage, entre la sortie fournie et la sortie désirée.

Un apprentissage est dit supervisé lorsque l'on force le réseau à converger vers un état final précis, en même temps qu'on lui présente un motif. A l'inverse, lors d'un apprentissage non-supervisé, le réseau est laissé libre de converger vers n'importe quel état final lorsqu'on lui présente un motif. Dans notre cas nous allons utiliser l'apprentissage supervisé.

V.2.3 Rétro-propagation du gradient

Une des principales capacités d'un réseau de neurones est d'apprendre, des modèles de lois d'apprentissage ont été réalisés dont la rétro-propagation est la plus connue. Cette technique consiste à rétro-propager l'erreur commise par un neurone à ses synapses et aux neurones qui y sont reliés. Pour les réseaux de neurones, on utilise habituellement la rétropropagation du gradient de l'erreur, cet algorithme repose sur la minimisation de l'erreur quadratique entre les sorties calculées et celles souhaitées.

V.3 Modélisation du transistor organique à base des réseaux de neurones

Un modèle d'un processus est une description mathématique de son fonctionnement, qui permet de rendre compte des relations existantes entre ses entrées et ses sorties. On parle aussi de boite noire, ce qui est le cas des réseaux de neurones, dont les paramètres peuvent être estimés par apprentissage. Les réseaux de neurones offrent l'avantage de la simplicité d'implantation et un temps de calcul relativement faible par rapport aux modèles numériques [146].

La modélisation par les réseaux de neurones de notre transistor doit passer par les étapes suivantes :

- Conception d'une base de données,
- Choix d'une structure de réseau de neurones (un algorithme approprier),
- Mesure de la performance du modèle obtenue.

En se basant sur les résultats expérimentaux du transistor, et en utilisant l'interface Matlab on a construit une base de données composée de 2980 exemples.

Après avoir construit la base de données, on procède à l'apprentissage du réseau de neurones. Dans notre cas, un réseau MLP a été choisi. L'intérêt de ce type de réseau est dans sa facilité d'implémentation avec la caractéristique d'approximation universelle.

Pour que le modèle ANN exprime fidèlement la variation de la réponse d'OFET, il faudra trouver une architecture optimale du réseau de neurones (MLP), nombre de couches cachées, nombre de neurones dans chaque couche, ainsi que la fonction d'activation pour chaque couche. L'apprentissage et l'optimisation du réseau est accompli par un programme structuré en MATLAB. Le réseau optimisé a quatre entrées, et un neurone dans la couche de sortie (I_{ds}).

Le tableau V.1 représente les différents résultats obtenus, cependant l'erreur MRE (mean relative error) de test converge vers le minimum dans l'architecture 4-9-10-1 ce qui justifie notre choix.

ANN structure	MRE % (Test)
4-9-10-1	1.4103
4-4-4-1	3.6466
4-20-15-1	1.6637
4-5-4-1	8.3205
4-9-10-4-1	3.7625

Tableau V.1 : Variation de l'erreur du test en fonction des différentes architectures [145]

Le tableau V.2 résume les paramètres optimisés du réseau pour la modélisation du transistor OFET.

Architecture	Feed-forward MLP					
Couche cachée	2					
Règle d'apprentissage	Rétro	o-propagatic	on des erreurs	(Back propa	gation)	
	Couche d'entrée				4	
Nombre de Neurones		lère couche	cachée		9	
	2	ème couche	cachée	-	10	
		Couche de	sortie		1	
		1ère cou	che	Lo	gsig	
La fonction de transfert		2ème cou	iche	Lo	Logsig	
	Couche de sortie		line	éaire		
		L(µm)	$\left V_{gs}\right (V)$	$ V_{ds} (V)$	t (nm)	
Définition des entrées	Min	10	0	0	5.7	
	Max	50	3	3	6	
	$ I_{ds} $ (µA)					
Définition des sorties	Min	lin 0				
	Max	4.96				
	Ba	se d'apprent	tissage	459	45%	
Base de données	Base de validation			229	22%	
		Base de te	est	339	%	
EQM d'apprentissage	<10 ⁻⁶					
Nombre d'itérations			2000			

Tableau V.2 : Caractéristiques du réseau.

Figure V.3 montre un très bon accord entre les résultats expérimentaux et les résultats prévus (ANN) ont été obtenu.



Figure V.3 : Validation de notre modèle neuronal pour la phase d'apprentissage.

Le modèle neuronal que nous avons développé pour un transistor organique est comparé au modèle physique de transistor organique via le logiciel de simulation ATLAS. Les paramètres utilisés dans la simulation numérique sont rassemblés dans le tableau V.3. Ce modèle ne tient pas compte les propriétés particulières des semi-conducteurs organiques (la densité de pièges, les résistances de contact), avec une énergie de gap 2.2 eV.

Matériau	Paramètre	Valeur
	Bande interdite (gap)	2.2 eV
	Densité effective de la bande de conduction	$2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$
Pentacène	Pentacène Densité effective de la bande de valence	
Permittivité		4.0
	Affinité (LUMO)	2.8 eV
	Dopage (Accepteur P Type)	$7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
Al_2O_3	Permittivité	4
(isolant de grille)	Epaisseur	5.7 nm

Le profil de flux du courant, caractéristiques de sortie, et le profil de potentiel de surface (1 nm au-dessus de l'interface du Pentacène / Al_2O_3) d'un OFET sont représentés dans la figure V.4 [145].



(a)

Chapitre V



Figure V.4 : (a) flux du courant, b) caractéristiques de sortie, c) profil typique du potentiel d'un transistor OFET (L=10 µm et W=100µm).

La figure V.5 représente les caractéristiques de transfert pour les différentes longueurs de canal (L=10-50 μ m).



Figure V.5 : Caractéristique de transfert pour les différentes longueurs de canal d'un OFET.



Figure V.6 : Comparaison des caractéristiques Courant-Tension I_{ds} - V_{ds} (L=10 μ m, W=100 μ m, et t=5.7nm).



Figure V.7 : Comparaison des caractéristiques Courant-Tension Ids-Vgs.

Les figures V.6 et V.7 présentent une comparaison entre les résultats prédits par le modèle neuronal (ANN) et le modèle physique (ATLAS) des différentes caractéristiques I-V (I_{ds} - V_{ds} et I_{ds} - V_{gs}) avec les résultats expérimentaux pour un transistor organique, et nous avons trouvé un bon accord aux niveaux des courbes de sorties et de transferts [145].

Nous remarquons une différence entre les courbes expérimentale et les courbes simulés par l'outil des éléments-finis (ATLAS), une explication possible de cet écart peut provenir du fait qu'on ne tient pas compte ici de la résistance de contact et la rugosité de surface (densité des pièges)

La logique floue et les réseaux de neurones forment aujourd'hui la base de la majorité des systèmes intelligents, il serait intéressant de fusionner les deux pour exploiter la richesse des deux approches.

V.4 Modélisation du transistor organique à base du système d'inférence flou

La logique floue et les réseaux de neurones artificiels sont des technologies complémentaires. Ces techniques ont chacune leurs forces et leurs faiblesses. La combinaison de ces deux approches dans un système intégré semble plus prometteuse pour le développement des systèmes intelligents [146].

Un système d'inférence flou, aussi appelé : le modèle flou est construit à partir de trois composants conceptuels :

- Base de règles : Une base des règles floues est composée de règles qui sont généralement déclenchées en parallèle.
- Base de données : définie les fonctions d'appartenance utilisées pour les règles floues.
- Le mécanisme de raisonnement : représente la procédure d'inférence appelée aussi le raisonnement approximatif.

La modélisation d'un système d'inférence flou (entrée/sortie) passe par trois étapes, essentielles (Figure V.8) :

- Fuzzification : cette première étape détermine le degré d'appartenance de chaque variable d'entrée. Celui-ci est déterminé à l'aide des fonctions d'appartenance définie dans le système.
- Inférence floue : composée par la base de règles et par la base de données. La combinaison des entrées avec les règles floues permet de tirer des conclusions.
- Défuzzification : les méthodes d'inférence fournissent une fonction d'appartenance résultante pour la variable de sortie .Il s'agit donc d'une information floue qu'il faut transformer en valeur numérique.

La **Fuzzification** consiste à transformer les entrées numériques en parties floues, Il est alors possible d'associer à des variables des coefficients d'appartenance à des sous-ensembles flous prenant des valeurs dans l'intervalle [0,1]. Ceci alimente alors le mécanisme d'**inférence** qui, à partir des valeurs d'entrées et selon la basse de connaissance, détermine la valeur correspondante de la sortie. Enfin, la **Défuzzification** joue le rôle inverse de la **Fuzzification**, en convertissant les parties floues relatives aux sorties du mécanisme d'inférence en sorties numériques.



Figure V.8 : Système d'inférence flou.

Le modèle ANFIS, connu sous le nom de réseau adaptatif à base de système d'inférence floue, développé par Jang et al en 1993 est une technique qui incorpore les concepts de la logique floue dans les réseaux de neurones [147]. Ce modèle simule la relation entre l'entrée et la sortie d'un processus à travers un apprentissage hybride pour déterminer la distribution optimale des fonctions d'appartenances. La Figure V.9 présente l'architecture du modèle ANFIS lié au modèle Takagi-Sugeno-Kang (TSK) [148].



Figure V.9 : Architecture du modèle ANFIS lié au modèle TSK.

Pour simplifier le modèle, nous considérons un système à deux entrées X_1 et X_2 , une seule sortie globale Y avec un modèle flou de type TSK de ce système, composé des deux règles suivantes:

Si X_1 est A_1 et X_2 est B_1

Alors
$$y_1 = f_1(X_1, X_2) = p_1 X_1 + q_1 X_2 + r_1$$
 (V.2)

Si X₁ est A₂ et X₂ est B₂

Alors $y_2 = f_2 (X_1, X_2) = p_2 X_1 + q_2 X_2 + r_2$ (V.3)

où p_i, q_i, r_i sont des coefficients constants. Le modèle flou est défini par la fonction f_i qui relie les entrées à la sortie numérique.

Le réseau adaptatif ANFIS est un réseau multicouche dont les connexions ne sont pas pondérées ou elles ont toutes un poids égal à 1 [147]. Les nœuds sont de deux types différents selon leur fonctionnalité: des nœuds adaptatifs (carrés), et des nœuds fixes (circulaires).

Le système Neuro-Flou (*ANFIS* : Adaptative Neuro-Fuzzy Inference System), constitue une hybridation de la logique floue et les réseaux de neurones pour exploiter la richesse des deux approches. Ce système ne nécessite pas d'expertise préalable, présente un grand choix des paramètres et un temps de convergence rapide.

V.5 Méthodologie de modélisation par ANFIS

La modélisation floue ou la construction d'un modèle flou peut être vu comme un processus d'identification de système. Ce processus est composé de trois phases :

- Phase d'identification de la structure du modèle : Cette phase se base sur la détermination de la structure de la base des règles, du nombre de symboles et de la structure des conclusions des règles.
- Phase d'identification des paramètres du modèle : Cette phase permet l'identification des paramètres d'entrée, des paramètres de sortie et de la base des règles.
- Phase de validation du modèle : Cette phase sert à tester la validité du modèle d'abord par rapport à l'ensemble d'apprentissage, puis sur de nouvelles données de test.

La figure V.10 présente le principe de fonctionnement d'un modèle ANFIS.

Nous avons construit notre modèle ANFIS qui relie les paramètres d'entrée (L, t_p , V_{ds} et V_{gs}) au paramètre de sortie I_d, *L* est la longueur de canal, t_p est l'épaisseur du film de pentacène, V_{ds} est la tension drain-source, V_{gs} est la tension grille-source, et I_d est le courant de drain en OFET. L'illustration correspondante est représentée sur la figure V.11.



Des paramètres ANFIS

Chapitre V





Figure V.11 : Structure d'ANFIS Sugeno du Premier ordre proposé pour l'estimation du courant de drain.

L'expression générique de la règle floue Si-Alors, dans lequel les sorties sont des combinaisons linéaires de leurs entrées, est donnée par

$$\label{eq:result} \begin{split} \text{Règle } K: Si \; L \; \text{est} \; A_i \; \text{et} \; t_p \; \text{est} \; B_i \; \text{et} \; V_{gs} \; \text{est} \; C_i \; \text{et} \; V_{ds} \; \text{est} \; D_i \\ \text{alors} \end{split}$$

$$f_{K} = p_{K}L + q_{K}t_{p} + h_{K}V_{gs} + g_{K}V_{ds} + r_{K}$$
i=1,2,...,n, k=1,2,...,m
(V.4)

où A_i , B_i , C_i et D_i sont des variables linguistiques pour les entrées, f_k est la sortie spécifiée par la règle floue, { p_k , q_k , h_k , g_k , r_k } sont des paramètres de sortie qui sont déterminées pendant le processus d'entraînement, m est le nombre total des règles floues Takagi-Sugeno-Kang Sialors, et n est le nombre des ensembles flous (fonctions d'appartenances) attachés à chaque entrée.

La sortie $O_{k,i}$ d'un nœud i de la couche k (appelée *nœud* (*i*, *k*)) dépend des signaux provenant de la couche k-1 et des paramètres du nœud (i, k)

• **Couche 1** : cette couche comporte autant de neurones qu'il y'a de sous ensembles flous dans le système d'inférence flou. Les nœuds de cette couche sont tous de types adaptatifs. Cette couche réalise la fuzzification des entrées c'est à dire qu'elle détermine les degrés d'appartenance de chaque entrée.

Le nombre d'appartenance pour les paramètres d'entrée est fixé à 3 pour chaque entrée, donc le nombre des règles floues Si-Alors de notre modèle ANFIS est égal à 81 (3 x 3 x 3 x 3). La sortie de la couche 1 est donnée par :

$$\left\{ \begin{array}{ll} O_{1,i} = \mu_{Ai}\left(L\right), & i = 1,2,3 \\ O_{1,i} = \mu_{Bi \cdot 3}\left(t_{p}\right), & i = 4,5,6 \\ O_{1,i} = \mu_{Ci \cdot 6}\left(V_{gs}\right), & i = 7,8,9 \\ O_{1,i} = \mu_{Di \cdot 9}\left(V_{ds}\right), & i = 10,11,12 \end{array} \right.$$

où i est le degré d'appartenance. Ces paramètres sont appelés les paramètres prémisses. Les sous ensemble flous choisies peut être de forme : Gaussien, triangle, trapézoïdal...

La fonction d'appartenance utilisée dans ce travail est la fonction gaussienne, O₁ est alors donnée par :

$$O_1 = \mu_{Ai}(x) = exp\left(\frac{-0.5(x-c)^2}{\sigma^2}\right)$$
 (V.6)

Avec c et σ sont l'ensemble des paramètres utilisés pour ajuster la forme de la fonction d'appartenance.

Couche 2 : les nœuds de cette couche sont des nœuds fixes (Π). Ils reçoivent les signaux de sortie de la couche précédente et envoient leur produit en sortie. Cette couche engendre le degré d'activation d'une règle.

$$O_{2,K} = \mu_{Ai}(L) \cdot \mu_{Bi-3}(t_p) \cdot \mu_{Ci-6}(V_{gs}) \cdot \mu_{Di-9}(V_{ds}) = W_K \quad , K = 1, 2, \dots m$$
(V.7)

• **Couche 3** : les nœuds de cette couche sont aussi des nœuds fixes (**N**). Chaque nœud dans cette couche calcule le degré normalisé d'une règle floue donnée. Le résultat à la sortie de chaque nœud représente la contribution de cette règle au résultat final.

$$O_{3,K} = \overline{W_{K}} = \frac{W_{K}}{\sum_{l=1}^{m} W_{l}}$$
(V.8)

• Couche 4 : Les nœuds dans cette couche sont des nœuds adaptatifs. Chacun de ces nœuds est relié à un nœud de normalisation correspondant et aux entrées initiales du réseau. La sortie d'un nœud *K* est donnée par :

$$o_{4,k} = \overline{w_k} f_k = \overline{w_k} (p_k L + q_k t_p + h_k V_{gs} + g_k V_{ds} + r_k)$$
(V.9)

où $\overline{W_K}$ est la sortie normalisée de la troisième couche, et $\{p_k, q_k, h_k, g_k, r_k\}$ est l'ensemble des paramètres. Ces paramètres sont appelés les paramètres conséquents.

• **Couche 5** : est représentée par un nœud unique au niveau du quel s'effectue la somme des signaux provenant de la couche précédente pour donner la sortie globale et finale du ANFIS.

$$o_{5,1} = \sum_{k=1}^{m} \overline{w_k} f_k = \frac{\sum_{k=1}^{m} w_k f_k}{\sum_{k=1}^{m} w_k}$$
(V.10)

Notons, que le système ANFIS est implémenté dans la boite à outils "Neuro-Fuzzy" de MATLAB.

Afin d'optimiser les valeurs des paramètres du modèle neuro-flou, l'apprentissage et la validation croisée des sous-ensembles sont adoptés. Les techniques de validation croisée (cross validation **K-fold**), permettent d'obtenir une estimation des performances en exploitant la totalité du jeu de données.

L'algorithme de validation croisée k-Fold consiste à diviser aléatoirement une base de données en k (folds) sous-ensembles (de même taille) disjoints numérotés de 1 à k (Figure V.12), la méthode est répétée K fois, dans ce travail, nous utilisons 5-Fold. L'erreur est estimée en calculant l'erreur quadratique moyenne (RMSE).



Figure V.12 : Illustration de la méthode K-fold cross validation (5-Fold).

V.6 Résultats et discussions

Chapitre V

La base de données utilisée pour notre modèle ANFIS est établie sur la base d'un modèle numérique des caractéristiques courant-tension d'un transistor OFET via l'utilisation du simulateur technologique et électrique ATLAS par éléments finis 2D (Chapitre III), l'apprentissage d'ANFIS est fait avec une base de données de 15000 éléments. Les valeurs minimales et maximales des paramètres d'entrée utilisées pour la construction de notre modèle ANFIS sont présentées dans le tableau V.4.

Tableau V.4 : Paramètres d'entrées utilisés pour la construction du modèle ANFIS pre	oposé.
--	--------

Paramètre	L (µm)	$t_p(nm)$	$V_{gs}(V)$	$V_{ds}(V)$
Min	10	10	0	0
Max	50	30	-3	-3

Pendant l'apprentissage d'ANFIS, l'algorithme d'optimisation hybride est employé pour déterminer les valeurs optimales des paramètres du SIF (Système d'inférence Floue) de type TSK. L'algorithme d'apprentissage hybride est une association de la méthode des moindres carrés et de la descente de gradient par rétro-propagation [149].

La performance du modèle ANFIS a été évaluée par le calcule du coefficient de corrélation (R) et l'erreur quadratique moyenne (RMSE) (évaluation de la différence entre les valeurs simulées et prédites).

$$RMSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{X_{i,Num} - X_{i,Pred}}{X_{i,Num}} \right)^{2}$$
(V.11)

où *N* représente la taille de la base de données, '*NUM*' et '*Pred*' indiquent les données numériques (SILVACO simulation) et les données calculées par la technique d'ANFIS respectivement.

Les paramètres utilisés dans ce travail sont résumés dans le tableau V.5.

Paramètres d'ANFIS	Spécification
Entrées/sortie	4/1
Type FIS	Sugeno
Méthode d'apprentissage SIF	hybride
Type d'appartenance d'entrée	Fonction Gaussien
Fonction d'appartenance de sortie	Linéaire
Règles floues	81
Époques	200

Tableau V.5: Paramètres du modèle A	ANFIS p	proposé	[125]
-------------------------------------	---------	---------	-------

L'optimisation des paramètres est effectué de telle manière que pendant la phase de formation de l'erreur entre la cible et la sortie de ANFIS est minimisée pour obtenir une bonne correspondance entre les réponses mesurées et prédites.

La figure V.13 montre un bon accord entre les résultats numériques et ceux prévus qui ont été obtenus par la technique d'ANFIS pour la phase d'apprentissage.



Figure V.13 : Validation du modèle ANFIS pour la phase d'apprentissage.

Comme nous l'avons déjà évoqué précédemment, le nombre des fonctions d'appartenance pour les paramètres d'entrée est fixé à 3 pour chaque entrée. ANFIS est sensible à nombre de fonction d'appartenance, un nombre additionnel des fonctions d'appartenances n'a pas toujours améliorer le résultat du modèle, mais aussi pour la simplicité d'implémentation du modèle ANFIS dans le logiciel de simulation PSPICE [125].

La meilleure configuration de fonction d'appartenance est illustrée sur la figure V.14.



Figure V.14 : Fonction d'appartenance gaussienne :a) longueur du canal (L), b) épaisseur du film de pentacène (t_p) , c) tension drain-source (V_{ds}) , d) tension grille-source (V_{gs}) .

Les figures V.15 (a) et (b) représentent les variations du courant de drain (I_{ds}) en fonction de la tensions de polarisation de grille (V_{gs}) et drain (V_{ds}) de notre modèle ANFIS du transistor OFET, tracées pour différentes longueurs de canal ($L=10\mu m$, $L=50\mu m$) et différentes épaisseurs de pentacène ($t_p=20nm$, $t_p=30nm$).

La figure V.16 représente la variation du courant de drain (I_{ds}) prédit par le modèle ANFIS en fonction de la longueur du canal (L) et l'épaisseur de pentacène (t_p).





Figure V. 15: Variation du courant de drain (I_{ds}) en fonction de V_{gs} et V_{ds} : a) $L=50 \ \mu m$ et $t_p=30 \ nm$; b) $L=10 \ \mu m$ et $tp=20 \ nm$.



Figure V.16 : Variation du courant de drain avec la longueur de canal (L) et l'épaisseur de pentacène (t_p) pour $V_{gs} = V_{ds} = -3V$.

Comme on peut le voir dans la figure V.16, le courant I_{ds} augmente avec la diminution de la longueur du canal en raison de réduction de la résistance du canal. De plus, l'augmentation de l'épaisseur de la couche du pentacène (augmentation de la taille des grains et diminution des défauts (les joints de grains)) améliore les performances d'OFET (courant I_{ds}). Nous remarquons que dans tous les cas, le modèle offre des résultats satisfaisants, il rend un bon comportement dans toutes les régions de fonctionnement.

V.7 Implantation du modèle ANFIS sur ORCAD-PSPICE

Afin de valider notre modèle ANFIS, tous les paramètres de fonctions d'appartenance d'entrée et les paramètres de sortie sont obtenues avec succès. Nous proposons d'implémenter le modèle ANFIS dans le simulateur PSPICE. Différents travaux se sont intéressés à l'implémentation des modèles de réseaux de neurones artificiels dans le simulateur PSPICE [150, 151]. Les modèles physiques tenir compte tous les phénomènes physiques qui ont lieu dans le composant demandent un volume de calcul assez grand, mais la simulation des circuits ne demande que la forme réelle du comportement électrique du composant sans descendre trop dans sa physique, donc un volume de calcul plus petit. L'avantage réside dans la rapidité de calcul et la capacité à concevoir des modélisations performantes avec un nombre réduit de paramètres.

L'utilisation des boites ABM (Analog Behavioral Modeling) de la bibliothèque de PSPICE, nous permet d'implanter le modèle ANFIS (les règles floues, le degré des règles floues, les paramètres de la fonction d'appartenance gaussienne pour les entrées...) sur ce simulateur. Le modèle ANFIS d'OFET possède 177 boites ABM [125]. Ce modèle ANFIS peut être utilisé comme une interface entre la modélisation numérique du composant et le simulateur électronique comme SPICE afin d'avoir un simple simulateur des circuits électroniques. Dans les Figures V.17 a et b, nous montrons respectivement le schéma de notre approche pour la simulation des circuits OFET et le programme PSPICE qui correspond à notre modèle ANFIS.



* source ANFIS	
.EXTERNAL INPUT L	
.EXTERNAL INPUT TP	
.EXTERNAL	INPUT VDS
.EXTERNAL INPUT VGS	
.EXTERNAL	OUTPUT Id
* C_i and σ_i are the premise parameter set used to adjust the shape of the membership function	
*{ p_k, q_k, h_k, g_k, r_k	} is the consequent parameter set of the node
* first layer	
E_ABM1	N2528094 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(L)-C1,2))/pwr(σ 1,2))}
E_ABM2	N2528094 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(L)-C2,2))/pwr(σ 2,2))}
E_ABM3	N2528094 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(L)-C3,2))/pwr(σ3,2))}
E_ABM4	N2527850 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(TP)-C4,2))/pwr(σ4,2))}
E_ABM5	N2528542 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(TP)-C5,2))/pwr(σ5,2))}
E_ABM6	N2528002 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(TP)-C6,2))/pwr(σ6,2))}
E_ABM7	N2531486 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(VDS)-C7,2))/pwr(σ 7,2))}
E_ABM8	N2527780 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(VDS)-C8,2))/pwr(σ8,2))}
E_ABM9	N2529274 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(VDS)-C9,2))/pwr(σ9,2))}
E_ABM10	N2528530 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(VGS)-C10,2))/pwr(σ 10,2))}
E_ABM11	N2528506 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(VGS)-C11,2))/pwr(σ 11,2))}
E_ABM12	N2527792 0 VALUE {exp(-0.5*(pwr(V(VGS)-C12,2))/pwr(σ 12,2))}
* Second layer	
E_ABM13	N2527898 0 VALUE { V(N2531486)*V(N2528530)*V(N2528226)*V(N2527850)}
E_ABM14	N2532768 0 VALUE { V(N2531486)*V(N2528530)*V(N2528226)*V(N2528542)}
E_ABM15	N2528230 0 VALUE { V(N2531486)*V(N2528530)*V(N2528226)*V(N2528002)}
*	
*	
E_ABM93	N2536552 0 VALUE { V(N2529274)*V(N2527792)*V(N2528094)*V(N2528402)}
* Third layer	
E_ABM94	N2535008 0 VALUE { V(N2527898)*
+ $(p_1 * V(L) + c$	$q_1 * V(TP) + g_1 * V(VDS) + h_1 * V(VGS) + r_1)$
E_ABM95	N2536780 0 VALUE { V(N2532768)*
+ $(p_2 * V(L) + c$	$a_2 * V(TP) + g_2 * V(VDS) + h_2 * V(VGS) + r_2)$
E_ABM96	N2538472 0 VALUE { (N2528230)*
+ $(p_3 * V(L) + c$	$a_3*V(TP)+g_3*V(VDS)+h_3*V(VGS)+r_3)$
*	
*	
*	
E_ABM174	N2527994 0 VALUE { V(N2536552)*
+ $(p_{81}*V(L)+a)$	$h_{21} V(TP) + g_{81} V(VDS) + h_{81} V(VGS) + r_{81})$
* Fourth layer	
E_ABM175	$N26263180$ VALUE { $V(N2535384) + V(N2537228) +$
+V(N2539176)+V(N2528346)+V(N2535268)+V(N2537448)+V(N2527994)	
* Fifth layer	
E_ABM1/6	$N_{2082455} \cup VALUE \{V(N_{252}/898) + V(N_{2532}/68) + V(N_{2528230}) + V(N_{252320}) + V(N_{25230}) + V(N_{25230}) + V(N_{25230}) + V(N_{25230}) + V(N_{2520}) + V(N_{25200}) + V(N_{25200}) + V(N_{2500}) + V(N$
+V(N25391/6	+V(N2528346)+V(N2535268)+V(N2537448)+V(N2527994)
T Output layer	NOCOMETA O MALLIE (MANOLEZCAZ) MANOLEZCAZ)
E_ABMI//	$N2530404 \cup VALUE \{(V(N265/64/)/V(N2650810))\}$

(b)

Figure V.17 : a) Schéma représentant notre approche pour la simulation des circuits OFET, b) programme PSPICE de notre modèle ANFIS.

SPICE est le formalisme usuel, référence mondiale pour simuler des circuits électriques avant touts réalisation [152]. L'implémentation des modèles ANFIS sous SPICE peut être réalisée avec une approche de type « **boite noire** ». C'est-a-dire ne tenant compte que du comportement entrées/sorties.

La figure V.18 (a) représente le circuit de simulation du transistor OFET. Le but de cette simulation est de prouver le comportement du modèle ANFIS du transistor OFET sous l'effet d'une charge résistive. La figure V.18 (b) représente la caractéristique I_{ds} -V_{ds} du modèle ANFIS pour L= 10 µm et t_p = 30 nm.



Figure V.18 : a) Circuit de simulation du modèle ANFIS dans PSPICE b) caractéristique de sortie PSPICE du modèle ANFIS obtenu pour $L=10 \ \mu m$ et $t_p = 30 \ nm$.

Notre objectif est le développement d'un modèle ANFIS, et l'implémentation de ce dernier dans l'environnement de simulation PSPICE, afin de valider notre modèle.
La figure V.19 compare les résultats expérimentaux et nos résultats de simulation basés sur le simulateur ATLAS de Silvaco et le modèle ANFIS pour les caractéristiques de sortie et de transfert en fonction de la longueur du canal [125]. Comme nous remarquons sur la figure V.19 (a) et (b), les caractéristiques expérimentales correspondent très bien à celles simulées. Cette comparaison montre l'applicabilité des systèmes Neuro-Flou (ANFIS) à l'étude des transistors organiques.



Figure V.19 : Comparaison entre nos résultats et les résultats expérimentaux : a) caractéristique de sortie d'un OFET pour L=10µm, b) caractéristique de transfert en fonction de la longueur de canal.

V.7.1 Inverseur organique

La porte logique « inverseur » comporte une entrée et une sortie, sa fonction logique est d'inverser le signal logique reçu. Cette porte logique est très importante en électronique numérique car elle est la base de toutes les portes logiques. L'inverseur organique peut donc être réalisé à partir d'un transistor OFET de types p, un générateur de tension et une résistance (Figure V.20 (a)).

Pour la vérification de notre modèle ANFIS, nous proposons la simulation d'un circuit inverseur organique. La fréquence de coupure étant directement liée à la transconductance g_m et la capacité de grille C_{gate} (F) par la relation (V.12) [153].

$$f_T = \frac{g_m}{2\pi C_{gate}} \tag{V.12}$$

 C_{gate} est obtenue à partir de la capacité par unité de surface de l'isolant (C_i) suivant la relation :

$$C_{gate} = C_i \, L \, W \tag{V.13}$$

Dans le cas de notre exemple, avec $L=10\mu \text{m}$ (10^{-3} cm), $W=100\mu \text{m}$, et $C_i=0.7\mu\text{F/cm}^2$, on obtient une capacité de grille de 7pF. On peut donc maintenant calculer la fréquence de coupure du transistor selon l'équation V.12 ($g_m=4.73\mu\text{s}$, Tableau V.5), f_T est égale à 0.1 MHz.

Les signaux d'entrée/sortie de notre inverseur implémenté dans le logiciel PSPICE peuvent être représentés dans la figure V.20(b) pour L=10 μ m, W=100 μ m, et t_p=30nm où on peut remarquer que l'opération de l'inversion a été bien effectuée [125]. La figure V.20 (c) représente la caractéristique de transfert (La tension de sortie V_{out} en fonction de la tension d'entrée V_{in}) de notre inverseur organique avec une simulation «**DC Sweep**», où V_{in}=V_{gs} est un signal continu linéaire qui varie de 0 à -3V. Donc le circuit modélise relativement fidèle la réponse entrée/sortie d'un inverseur organique. Chapitre V



Figure V.20 : a) Modèle ANFIS sous SPICE du circuit inverseur, b) les signaux PSPICE d'entrée/sortie de notre inverseur ANFIS, c) caractéristique de transfert de notre inverseur ANFIS $(L=10\mu m, W=100\mu m, t_p=30nm).$

La figure (V.21a) présente les fonctions de transfert pour notre inverseur organique, la tension V_{DD} appliquée est entre -1.5V et -3V avec un pas de -0.5V, où $V_{in}=V_{gs}$ est un signal continu linéaire qui varie de 0 à -3V. Pour les tensions V_{DD} inférieures à -1.5V l'inverseur ne fonctionne plus du fait qu'on se rapproche trop des tensions seuils des transistors voisines de -1.2V. Nous présentons dans la figure (V.21b) la caractéristique de transfert pour un inverseur dont les longueurs de canal des transistors sont de 10µm, 20µm et 50µm. La figure (V.21c) présente les fonctions de transfert d'un inverseur pour t_p=10nm et t_p=30nm (L=10µm).



Figure V.21 : a) Caractéristiques de transfert suivant la tension de polarisation de notre inverseur ANFIS (L=10µm, W=100µm, tp=30nm), b) Caractéristiques de transfert pour différentes longueurs de canal, c) Caractéristiques de transfert suivant l'épaisseur du pentacène [125].

V.7.2 Porte NOR organique

Notre modèle ANFIS est soumis à une autre vérification, mais cette fois avec la porte logique NOR. La figure V.22 représente le modèle ANFIS sous SPICE du porte logique NOR pour deux transistor P-OFET identique et les signaux PSPICE d'entrées/sortie de notre porte logique NOR (V_{DD} =-3V, L_1 =L₂=10µm, W_1 =W₂=100µm, t_{p1} = t_{p2} =30nm). On peut remarquer que le circuit modélise relativement fidèle la réponse entrées/sortie d'une porte logique NOR organique.



Figure V.22 : a) Modèle ANFIS sous SPICE de la porte logique NOR pour deux transistors P-OFET identiques, b) Les signaux PSPICE d'entrées/sortie de notre porte logique NOR (V_{DD} =-3V, L=10µm, W=100µm, t_p =30nm).

V.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous présentons l'applicabilité des techniques d'intelligence artificielle (ANN et ANFIS) pour la simulation des circuits électroniques organique. Tout d'abord, nous avons présenté une approche à base des réseaux de neurones artificiels; elle permet de prédire les caractéristiques courant-tension d'un transistor organique.

Notre deuxième contribution dans ce chapitre était de développer un nouveau modèle d'optimisation basé sur la théorie d'un système Neuro-Flou (*ANFIS*), afin d'avoir un outil simple, fiable et performant, nous avons intégré avec succès notre modèle ANFIS du transistor OFET sous SPICE. La base de données a été décrite en utilisant les simulations par la méthode des éléments finis en 2D (ATLAS de Silvaco). La validation du modèle ANFIS sous SPICE du transistor OFET a été faite par comparaison entre la simulation et les caractéristiques expérimentales. Les résultats obtenus nous ont encouragé d'adopter notre approche pour l'étude et la simulation des circuits électroniques organiques.

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

La naissance de l'électronique organique est considérée comme une révolution. De nombreux chercheurs s'intéressent de plus en plus à l'électronique organique présentant de nombreux atouts ; la flexibilité, légèreté, facilité de fabrication, et notamment le rapport coût / performance la rendant attractive pour de nombreuses applications. Néanmoins, les dispositifs organiques présentent certaines limites, notamment la compréhension des mécanismes régissant le transport de charges dans un SCO (injection, piégeage des charges, ...).

Ce travail de thèse porte sur la modélisation et la simulation du transistor organique. L'objectif de la simulation est d'analyser les comportements physiques des transistors organiques en prenant en compte les propriétés des matériaux organiques dans le calcul des caractéristiques courant-tension du transistor, puis en agissant sur ces paramètres afin d'améliorer les performances de ces dispositifs, et par conséquence celui des circuits électroniques organiques.

Après avoir rappelé dans la première partie du manuscrit les notions de base sur les semi conducteurs organiques, notamment leur structure, la notion de porteurs de charges, le transport des charges et le principe de fonctionnement des transistors organiques, nous avons entrepris, dans la seconde partie, la modélisation des transistors organiques.

L'objectif de la modélisation est de minimiser l'écart entre le résultat expérimental et celui prévu par le modèle pour que la simulation puisse bien reproduire le fonctionnement des circuits conçus. La nature approximative de la modélisation compacte fait qu'un modèle de ce genre ne sera jamais parfait. Néanmoins il peut devenir de plus en plus réaliste avec l'insertion de nouveaux phénomènes physique ou la prise en compte du plus grand ensemble de conditions de simulation possibles.

En premier lieu, nous avons présenté un modèle analytique de la tension de seuil d'un transistor organique par la résolution d'un système d'équations unidimensionnel (1D) de Poisson en prenant en compte le profil de dopage gaussien du canal. Nous avons vu que sous l'effet de dopage des régions source-drain une amélioration importante est présente dans les caractéristiques I-V de transistor, à cause de la nature d'interface entre le métal et le semi conducteur ou bien la résistance de contact. La résistance d'accès (résistance source +

résistance drain) devient un facteur très important pour le courant de drain. Pour ne pas diminuer ce courant de drain, la résistance d'accès doit être la plus faible possible.

Nous avons détaillé ensuite l'environnement de simulation numérique 2D pour simuler des transistors organiques à l'aide du logiciel commercial ATLAS de Silvaco. Les limitations constatées comme un ajustement des courbes I-V moins satisfaisant pour les densités de courant où la nécessité de connaître de nombreux paramètres sur les SCO. Dans notre travail, nous nous sommes surtout intéressés à la famille des acènes et plus particulièrement au pentacène. Nous avons utilisé les paramètres du pentacène (énergie de gap, affinités électronique, densités des pièges...) de la littérature dans le logiciel afin d'étudier l'effet de ces paramètres sur le fonctionnement d'un transistor organique. Le bon accord entre les courbes issues de la simulation et les courbes expérimentales valide la démarche adoptée pour la modélisation. Le but est de montrer qu'il est possible de valider par la simulation les résultats compilés concernant les propriétés électriques du pentacène et des transistors à base de pentacène.

Ensuite, nous avons présenté un modèle analytique capable de simuler les caractéristiques courant-tension d'un transistor OFET, l'objectif principal est de décrire une expression analytique unique qui couvre tous les régimes de fonctionnement. Nous avons montré l'applicabilité des AGs pour l'extraction des paramètres d'un transistor organique, puis une comparaison entre les courbes issues de la simulation et les courbes expérimentales est effectuée pour trois échantillons. Cette comparaison montre clairement que les paramètres extraits à partir des simulations du comportement des transistors décrivent le comportement souhaité de l'OFET, ce qui semble en accord avec des résultats publiés dans la littérature. Cette partie a donc pour objectif de comparer les performances de cette technique d'optimisation pour la modélisation des caractéristiques I-V pour l'OFET, afin de vérifier la validité de notre modèle.

La dernière partie a été consacrée au développement d'une approche basée sur la théorie d'un système Neuro-Flou (*ANFIS*) qui permet de prédire les comportements principaux des transistors OFETs. La base de données a été décrite en utilisant les simulations par la méthode des éléments finis en 2D (ATLAS de Silvaco). Après l'optimisation, l'ensemble des règles floues, le degré des règles floues, et les paramètres de la fonction d'appartenance gaussienne pour les entrées sont implémentés dans le logiciel de simulation (PSPICE) afin d'obtenir notre modèle ANFIS du transistor OFET. La validation du modèle ANFIS sous SPICE du transistor OFET a été faite par comparaison entre la simulation et les

caractéristiques expérimentales. Les résultats obtenus sont encourageants afin d'adopter notre approche pour l'étude et la simulation des circuits électroniques organiques.

La simulation numérique est basée sur une connaissance des phénomènes qui ne peut être obtenue que par l'expérimentation. Une simulation ne peut donc être réalisée que si on dispose d'un acquis de connaissances suffisant obtenu par des expérimentations sur des phénomènes antérieurs et analogues.

A la fin de cette thèse nous proposons quelques perspectives pour développer ce travail :

- Faire une prospection avec d'autres matériaux pour les électrodes (contacts en pentacène fortement dopées).
- > La modélisation analytique en intégrant l'effet des contacts.
- La modélisation du fonctionnement et des caractéristiques électriques des transistors organiques par d'autres outils de modélisation tels que Monte-Carlo, stochastique.
- L'étude de l'influence de la miniaturisation sur les performances des transistors organiques.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Bibliographie

- H. Shirakawa, E. J. Louis, A. G. MacDiarmid, C. K. Chiang, and A. J. Heeger, "Synthesis of electrically conducting organic polymers: halogen derivatives of polyacetylene, (CH)x," Journal of the Chemical Society, Chemical Communications, Issue 16, pp. 578–580, 1977.
- [2] H. S. Byun, Y. Xu, C. K. Song, "Fabrication of high performance pentacene thin film transistors using poly(4-vinylphenol) as the gate insulator on polyethyleneterephthalate substrates" Thin Solid Films Vol. 493, Issues 1-2, pp. 278-281, 2005.
- [3] M. Kitamura, T. Imada, Y. Arakawa, "Organic light-emitting diodes driven by pentacene-based thin-film transistors" App. Phys. Lett, Vol. 83, pp. 3410-3412, 2003.
- [4] C. W. Tang, "Two-layer organic photovoltaic cell" Applied Physics Letters, Vol. 48, pp. 183-185, 1986.
- [5] B. Crone, A. Dodabalapur, A. Gelperin, L. Torsi, H. E. Katz, A. J. Lovinger, Z. Bao, "Electronic sensing of vapors with organic transistors" Applied Physics Letters, Vol. 78, no 15, pp. 2229-2231, 2001.
- [6] Organic Field Effect Transistor, GIST Photonics Polymer LAB.
- [7] C. Ceconni, "L'éssor du papier électronique" CFC N°193, pp. 51-56, Septembre 2007.
- [8] D. Dhakal "Ultra Low Cost RFID tags design using Organic Field Effect Transistor on plastic substrate" 2009.
- [9] C. Collet, S. Roy, "L'électronique organique en Allemagne : Un domaine émergent et stratégique" Berlin, octobre 2012.
- [10] Organic Electronic Association (OE-A), Organic and Printed Electronics, VDMA, 3rd edition, 2009.
- [11] Z. Bao, A. Dodabalapur, and A.J. Lovinger, "Soluble and processable regioregular poly(3hexylthiophene) for thin film field-effect transistor applications with high mobility" Applied Physics Letters, Vol.69, pp. 4108-4110, 1996.
- [12] G. Wang, T. Hirasa, D. Moses, and A.J. Heeger, "Fabrication of regioregular poly(3hexylthiophene) field-effect transistors by dip-coating" Synthetic Metals, vol.146, no. 2, pp. 127-132,2004.
- [13] H. Sirringhaus, T. Kawase, R.H. Friend, T. Shimoda, M. Inbasekaran, W. Wu, and E.P. Woo, "High-resolution inkjet printing of all-polymer transistor circuits" Science, vol. 290, pp. 2123-2126, 2000.
- [14] W. H. Brown and T. Poon, "Introduction to Organic Chemistry" 2nd ed. New York: Wiley, 2004.
- [15] M. Koželj, "Application of Organic Semiconductors for the Detection of Ionizing Radiations" International Conference Nuclear Energy for New Europe, Slovenia, September 2006.
- [16] A.-J. Attias, Polymères conjugués et polymères conducteurs électroniques, Techniques de l'Ingénieur, E1862.
- [17] N. Karl, Festkörper probleme 14, "organic semiconductors," Advances in Solid State Physics, Vol. 14, pp. 261-290, 1974.

- [18] Ioannis Kymissis, "Organic Field Effect Transistors Theory, Fabrication and Characterization" Columbia University, New York:springer, 2009.
- [19] M. Pfeiffer, K. Leo, X. Zhou, J. S. Huang, M. Hofmann, A. Werner, and J. Blochwitz-Nimoth, "Doped organic semiconductors: Physics and application in light emitting diodes," Org. Electron., vol. 4, pp. 89–103, 2003.
- [20] W. Gao and A. Kahn, "Electrical doping: the impact on interfaces of π conjugated molecular films," J. Phys. Condens. Matter, vol. 15, pp. 757–770, 2003.
- [21] C. Bock, D. V. Pham, U. Kunze, D. Käfer, G. Witte, and C. Wöll, "Improved morphology and charge carrier injection in pentacene field-effect transistors with thiol-treated electrodes," J. Appl. Phys., vol. 100, pp. 114517, 2006.
- [22] V. I. Arkhipov, E. V. Emelianova, Y. H. Tak et al., "Charge injection into light emitting diodes: Theory and experiment," J. Appl. Phys, Vol.84, pp. 848–856, 1998.
- [23] B. Kippelen and J. L. Bredas, "Organic photovoltaics," Energy Environ. Sci., vol. 2, pp. 251–261, 2009.
- [24] R. Bettignies, "Cellules photovoltaïques organiques dérivées de nouveaux systèmes conjugués," Thèse de doctorat, Université d'Angers, 2006.
- [25] christof wöll, "physical and chemical apects of organic electronics", WILEY-VCH, 2009.
- [26] J. L. Brédas, R.R. Chance, R. Silbey, G. Nicolas, and P. Durand, "Valence effective Hamiltonian study of the electronic structure of poly(p-phenylene) and poly(pphenylene sulfide)," Journal of Chemical Physics, Vol. 77, no. 1, pp. 371-378, 1982.
- [27] O. D. Jurchescu, J. Baas, T. T. M. Palstra, "Effect of impurities on the mobility of single crystal pentacene," Applied Physics Letters, Vol. 84, Issue 16, pp. 3061-3063, 2004.
- [28] P.W.M. Blom, M.J.M.d. Jong, and M.G.v. Munster, "Electric-field and temperature dependence of the hole mobility in poly(p-phenylene vinylene)" Physical Review B 55, 1997.
- [29] S.V. Rakhmanova and E.M. Conwell, "Mobility variation with field in conducting polymers films" Synthetic Metals, Vol. 116, Issues 1–3, pp. 389–391, 2001.
- [30] R. G. Kepler, P.M. Beeson, S.J. Jacobs, R.A. Anderson, M.B. Sinclair, V. V.S., and P.A. Cahill, "Electron and hole mobility in tris(8-hydroxyquinolinato-N1,O8) aluminium," Applied Physics Letters,1995.
- [31] W.W. Zhu, S. Xiao, and I. Shih, "Field-effect mobilities of polyhedral oligomeric silsesquioxanes anchored semiconducting polymers," Applied Surface Science, Vol. 221, Issues 1-4, pp. 358-363, 2004.
- [32] G. Horowitz, "Organic field-effetc transistors," Advanced Materials, Vol. 10, pp. 365-377, 1998.
- [33] M. C. J. M. Visssenberg and M. Matters,"Theory of the field-effect mobility in amorphous organic transistors," Physical Review B, 1998.
- [34] G. Horowitz, R. Hajlaoui, and P. Delannoy, "Temperature dependance of the field-effect mobility of sexithiophene. determination of the density of traps," J. Phys. III France, Vol. 5, no. 4, pp. 355– 371, 1995.
- [35] H. Bässler, "Charge Transport in Disordered Organic Photoconductors a Monte Carlo Simulation Study," physica status solidi (b), Vol. 175, Issue 1, pp. 15–56, 1993.

- [36] J. P. Pouget, C. H. Hsu, A. G. Mac Diarmid, and A. J. Epstein, "Structural investigation of metallic PAN-CSA and some of its derivatives", Synthetic Metals, Vol. 69, Issues 1–3, pp. 119-120,1995.
- [37] W. D. Gill, "Drift mobilities in amorphous charge-transfer complexes of trinitrofluorenone and poly-n-vinylcarbazole," J. Appl. Phys, Vol 43, No 12, pp. 5033-5044, 1972.
- [38] A. L. Deman, Influence du diélectrique de grille et de la structure moléculaire du semi conducteur sur les performances de transistors organiques, Thèse de doctorat, Ecole centrale de Lyon, 2005.
- [39] W. Warta and N. Karl, "Hot holes in naphthalene: High, electric-field-dependent mobilities," Physical Review B 32, pp. 1172-1182, 1985.
- [40] N. Karl, J. Marktanner, R. Sthele, and W. Warta, "High field effect saturation regime of charge carrier drift velocities in ultrapurfied organic photoconductors," Synthetic metals, Vol. 42, pp. 2473-2481, 1991.
- [41] R.W. I. de Boer, M.E. Gershenson, A.F. Morpurgo, and V. Podzorov, "Organic single crystal field-effect transistors," Physica Status Solid (A), Vol. 201, Issue 6, pp. 1302-1331, 2004.
- [42] A. Miller and E. Abrahams, "Impurity conduction at low concentrations," Physical Review, Vol. 120, Issue 3, pp. 745–755, 1960.
- [43] G. Horowitz, M. E. Hajlaoui, and R. Hajlaoui. "Temperature and gate voltage dependence of hole mobility in polycrystalline oligothiophene thin film transistors," Journal of Applied Physics, Vol. 87, pp. 4456, 2000.
- [44] M. C. J. M. Visssenberg. PhD thesis, Université de Leiden, 1999.
- [45] P. G. Le Comber, W. E. Spear, "Electronic Transport in Amorphous Silicon Films," Physical Review Letters, Vol. 25, Issue 8, pp. 509-511, 1970.
- [46] G. Horowitz and M. E. Hajlaoui, "Grain size dependent mobility in polycrystalline organic fieldeffect transistors," Synthetic Metals, Vol. 122, Issue 1, pp.185–189, 2001.
- [47] A. Tsumura, H. Koezuka, and T. Ando, "Macromolecular electronic device: Field-effect transistor with a polythiophene thin film" Appl. Phys. Lett, Vol. 49, Issue 18, pp. 1210-1212, 1986.
- [48] A. K. Diallo, Transistors organiques pour des applications biocapteurs, Thèse de doctorat, Ecole centrale de Lyon, 2008.
- [49] C. J. Drury, C. M. J. Mutsaers, C. M. Hart, M. Matters, D. M. de Leeuw, Appl. Low-cost allpolymer integrated circuits, Applied Physics Letters, Vol. 73, Issue 1, pp. 108-110, 1998.
- [50] W. Brütting, "Physics of Organic Semiconductors" WILEY-VCH, 2005.
- [51] M. EROUL, Etude sur les transistors organiques à vocation capteur de gaz : Application à la détection de gaz nitrés, Thèse de doctorat, Ecole centrale de Lyon, 2008.
- [52] A. Kahn, N. Koch, and W. Gao, "Electronic Structure and Electrical Properties of Interfaces between Metals and Pi-Conjugated Molecular Films," Journal of Polymer Science: Part B: Polymer Physics, Vol. 41, pp.2529, 2003.
- [53] G. WANTZ, "Elaboration, caractérisation et optimisation de diodes électroluminescentes a base de polymères conjugues" Thèse de doctorat, université de Bordeaux I, 2004.
- [54] J. Hwang, A. Wan, and A. Kahn, "Energetics of metal-organic interfaces: New experiments and assessment of the field," Mater. Sci. Eng. R, vol. 64, pp. 1–31, 2009.

- [55] G. Horowitz, "cours électronique organique", Université Paris Diderot, 2012.
- [56] Shen, Y. et al, "How To Make Ohmic Contacts to Organic Semiconductors." ChemPhysChem, Vol. 5, Issue 1, pp. 16-25, 2004.
- [57] C. R. Newman, C. D. Frisbie, D. A. da Silva Filho, J.-L. Bredas, P. C. Ewbank, and K. R. Mann, "Introduction to organic thin film transistors and design of n-channel organic semiconductors." Chemical Materials, Vol. 16, pp. 4436-4451, 2004.
- [58] A. R. Brown, C. P. Jarrett, D. M. de Leeuw, M. Matters, "Field-effect transistors made from solution-processed organic semiconductors, Synthetic Metals, Vol. 88, pp. 37-55, 1997.
- [59] C. Bartic, H. Jansen, A. Campitelli, and S. Borghs, "Ta2O5 as gate dielectric material for low-voltage organic thin-film transistors" Organic Electronics, Vol. 3, Issue 2, pp. 65-72, 2002.
- [60] T. G. Bäcklund, H. G. O. Sandberg, R. Österbacka, H. Stubb, "Towards all-polymer field effect transistors with solution processable materials", Synthetic Metals, Vol. 148, pp. 87-91, 2005.
- [61] L. rapp, "Impression par laser (LIFT) de transistors organiques en films minces", Thèse de doctorat, université de Provence (Aix-Marseille II), France, 2011.
- [62] D. Gupta, M. Katiyar, and De. Gupta, "An analysis of the difference in behavior of top and bottom contact organic thin film transistors using device simulation" Organic Electronics, Vol. 10, pp. 775-784 2009.
- [63] S.R. Forrest ,"The path to ubiquitous and low-cost organic electronic appliances on plastic," Nature, Vol. 428, pp. 911-918, 2004.
- [64] P. V. Necliudov, M. S. Shur, D. J. Gundlach, and T. N. Jackson, "Modeling of organic thin film transistors of different designs," Applied Physics Letters, vol. 88, no. 11, pp. 6594–6597, 2000.
- [65] S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, second edition, John Wiley & Sons, New York, 1981.
- [66] M. Devynck, Transistors Organiques A Effet De Champ" Thèse de doctorat, université de Bordeaux I, 2012.
- [67] G. Horowitz, P. Lang, M. Mottaghi, and H. Aubin, "Extracting parameters from the currentvoltage characteristics of organic field-effect transistors" Advanced Functional Materials, Vol. 14, Issue 11, pp. 1069–1074, 2004.
- [68] P. Mittal, B.Kumar, Y.S.Negi, B. K.Kaushik, R. K.Singh, "Channel length variation effect on performance eparameters of organic field effect transistors", microelectronics journal, Vol. 43, Issue 12, pp. 985-994, 2012
- [69] K. Ryu, I. Kymissis, V. Bulovic, and C.G. Sodini, "Direct extraction of mobility in pentacene ofets using C-V and I-V measurements" IEEE Electron Device Letters, Vol. 26 ,no. 10, pp. 716-718, 2005.
- [70] A. V. Mühlenen, Transistor organiques ultraminces à base de pentacène, Thèse de doctorat, école polytechnique fédérale de lausanne, 2007.
- [71] C. Melzer and H.v. Seggern, "Organic Field-Effect Transistors for CMOS Devices", Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009.
- [72] G. Horowitz, R. Hajlaoui, H. Bouchriha, R. Bourguiga, and M. Hajlaoui. "The concept of threshold voltage in organic field-effect transistors" Advanced Materials, Vol. 10, pp. 923-927, 1998.

- [73] E. J. Meijer, C. Tanase, P.W. Blom, E. van Veenendaal, B. H. Huisman, D. M. de Leeuw, T. M. Klapwicjk, "Switch-on voltage in disordered organic field-effect transistors" Applied physics letters, Vol. 80, Issue 20, pp. 3838-3840, 2002.
- [74] M. Mottaghi and G. Horowitz. "Field-induced mobility degradation in pentacene thin-film transistors" Organic Electronics, Vol. 7, Issue 6, pp. 528–536, 2006.
- [75] H. Sirringhaus, P. J. Brown, R. H. Friend, M. M. Nielsen, K. Bechgaard, B. M. W. Langeveld-Voss, A. J. H. Spiering, R. A. J. Janssen, E. W. Meijer, P. Herwig, D. M. de Leeuw, "Twodimensional charge transport in self-organized, high-mobility conjugated polymers" Nature 401, pp. 685-688.1999.
- [76] H. Sirringhaus, R. H. Friend, X.C.Li, S. C. Moratti, A. B. Holmes, N. Feeder, "Bis (dithienothiophene) organic field-effect transistors with a high ON/OFF ratio" applied physics letters, Vol. 71, Issue 26, pp. 3871-3873, 1997.
- [77] L. Torsi, A. Dodabalapur and H.E. Katz, An analytical model for short-channel organic thin-filmtransistors, Journal of Applied Physics, Vol. 78, pp. 1088-1093, 1995.
- [78] SJ Kang, M Noh, DS Park, HJ Kim, CN Whang, CH Chang, "Influence of postannealing on polycrystalline pentacene thin film transistor" Journal of applied physics, Vol. 95, Issue 5, pp. 2293-2296, 2004.
- [79] L. Wolfgang, B. Batlogg, "Calculating the trap density of states in organic field-effect transistors from experiment: a comparison of different methods. American Physical Society", physical review B, vol. 81, no. 3, pp. 035327–035340, 2010.
- [80] R. MACABIES, "Propriétés et stabilité de l'interface isolant pentacene dans les transistors organiques a effet de champ", Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines, Saint-Eienne, 2011.
- [81] K. Suemori, S. Uemura, M. Yoshida, S. Hoshino, N. Takada, T. Kodzasa, and T. Kamata, "Influence of fine roughness of insulator surface on threshold voltage stability of organic fieldeffect transistors" Applied Physics Letters, Vol. 93, no. 3, pp. 033308-033311, 2008.
- [82] S. Steudel, S. De Vusser, S. De Jonge, D. Janssen, S. Verlaak, J. Genoe, and P. Heremans, "Influence of the dielectric roughness on the performance of pentacene transistors" Applied Physics Letters, Vol. 85, no. 19, pp. 4400-4402, 2004.
- [83] A. Salleo, M. L. Chabinyc, M. S. Yang, R. A. StreetPolymer, "thin-film transistors with chemically modified dielectric interfaces", Applied Physics Letters, Vol. 81, no. 23, pp. 4383-4385, 2002.
- [84] T. W. Kelley, D. V. Muyres, P. F. Baude, T. P. Smith, T. D. Jones, "High performance Organic Thin Film Transistors" materials research society, Vol. 771, 2003.
- [85] C. D. Dimitrakopoulos, S. Purushothaman, J. Kymissis, A. Callegari, J. M. Shaw, "Low-voltage organic transistors on plastic comprising high-dielectric constant gate insulators", Science, Vol. 283, no. 5403, pp. 822-824, 1999.
- [86] J. Veres, S. D. Ogier, S. W. Leeming, D. C. Cupertino and S. M. Khaffaf, "Low-k Insulators as the Choice of Dielectrics in Organic Field-Effect Transistors" Advanced Functional Materials, Vol. 13, Issue 3, pp. 199–204, 2003.
- [87] Z. Bao, A. J. Lovinger, A. Dodabalapur, "Highly ordered vacuum-deposited thin films of metallophthalocyanines and their applications in field-effect transistors" Advaced Materials, Vol. 9, Issue 1, pp. 42-44, 1997.

- [88] J. Puigdollers, C. Voz, I. Martin, M. Vetter, A. Orpella, R. Alcubilla, "Electrical, characterization of pentacene thin-film transistors with polymeric gate dielectric" Synthetic metals, Vol.146, no. 3, pp. 355-358, 2004.
- [89] L.L. Chua, P. K. H. Ho, H. Sirringhaus, and R. H. Friend, "high-stability ultrathin spin-on benzocyclobutene gate dielectric for polymer filed-effect transistor" Applied Physics Letters, Vol. 84, pp. 3400-3402, 2004.
- [90] A. Maliakal, Organic Field-Effect Transitors, chapter Dielectric Materials: Selection and Design, pp. 229–251, CRC Press Taylor & Francis Group, 2007.
- [91] A.-L. Deman, J. Tardy, "PMMA–Ta2O5 bilayer gate dielectric for low operating voltage organic FETs" Organic Electronics, Vol. 6, Issue 2, pp. 78–84, 2005.
- [92] A.-L. Deman, M. Erouel, D. Lallemand, M. Phaner-Goutorbe, P. Lang, J. Tardy, Growth related properties of pentacene thin film transistors with different gate dielectrics journal of Non-Crystalline Solids, Vol. 354, pp. 1598-1607, 2008.
- [93] Z. T. Zhu, J. T. Mason, R. Dieckmann, and G. G. Malliaras, "Humidity sensors based on pentacene thin-film transistors" Applied physics letters, Vol.81, Issue 24, pp. 4643-4645, 2002.
- [94] D. Li, E.J. Borkent, R. Nortrup, H. Moon, H. Katz, and Z. Bao, "Humidity Effect on Electrical Performance of Organic Thin-film Transistors" Applied Physics letters, Vol.86, pp. 042104-042106, 2004.
- [95] R. Ye, M. Baba, K. Suzuki, Y. Ohishi, and K. Mori, "effects of O2 and H2O on electrical characteristics of pentacene thin film transistors" Thin Solid Films, Vol. 464, pp. 347-440, 2004.
- [96] S. Alborghetti, J. M. D. Coey, and P. Stamenov, "Dependence of charge carrier injection on the interface energy barrier in short-channel polymeric field effect transistors" Applied Physics letters 100, 143301, 2012.
- [97] I. EL HOUTI EL JAZAIRI, "Transistors organiques transparents et imprimes a base de pentacène," Thèse de doctorat, Université de Limoges, SANTE, 2009.
- [98] C. Shim, F. Maruoka, and R. Hattori, "Structural Analysis on Organic Thin-Film Transistor with Device Simulation," IEEE Trans. Electron Devices, vol. 57, no. 1, pp. 195-200, Jan 2010.
- [99] S. Schaur, P. Stadler, B. Meana-Esteban, H. Neugebauer, N. Serdar, "Electrochemical doping for lowering contact barriers in organic field effect transistors" Organic Electronics, Vol. 13, Issue 8, pp. 1296–1301, 2012.
- [100] S. Luan and G.W. Neudeck, "An experimental study of the source/drain parasitic resistance effects in amorphous silicon thin film transistors" Journal of Applied Physics, Vol. 72, pp. 766-772, 1992.
- [101] J. Zaumseil, K.W. Baldwin, J.A. Rogers, "Contact resistance in organic transistors that use source and drain electrodes formed by soft contact lamination" J. Appl. Phys. Vol. 93, no 10, pp. 6117–6124, 2003.
- [102] ATLAS User's Manual: Device simulation software, Silvaco International, Santa Clara, CA, (2012) January 18.
- [103] G. Horowitz, X.-Z. Peng, D. Fichou, and F. Garnier, "Organic thin-film transistors using π conjugated oligomers: Influence of the chain length" Journal of molecular electronics, Vol. 7, no. 2, pp. 85-89, 1991.

- [104] Y.-Y. Lin, D. Gundlach, S. Nelson, and T. Jackson, "Stacked pentacene layer organic thin-film transistors with improved characteristics" Electron Device Letters, IEEE, Vol. 18, Issue 12, pp. 606-608, 1997.
- [105] C.D. Dimitrakopoulos and R.L. Malenfant Patrick, "Organic thin film transistors for large area electronics", Advanced Matter, Vol. 14, pp. 99-117, 2002.
- [106] C. A. Lee, D.-W. Park, K.-D. Jung, B.-j. Kim, Y. C. Kim, J. D. Lee, and B.-G. Park, "Hysteresis mechanism in pentacene thin-film transistors with poly (4-vinyl phenol) gate insulator" Applied physics letters, Vol. 89, Issue 26, pp. 262120, 2006.
- [107] L. Sebastian, G. Weiser and H. Bässler, "Charge transfer transitions in solid tetracene and pentacene studied by electroabsorption", Chemical Physics, Vol. 61, P. 125-135, 1981.
- [108] P.G. Schroeder, C.B. France, J.B. Park and B.A. Parkinson, "Energy level alignment and twoimensional structure of pentacene on Au (111) surfaces", Appl. Phys. Lett, Vol. 91, pp. 3010-3041, 2002.
- [109] H. Klauk, U. Zschieschang and M. Halik, "Low-voltage organic thin-film transistors with large Transconductance", J. Appl. Phys, vol. 102, issue 7, pp. 074514-1 074514-7, 2007.
- [110] J.B. Koo, J.W. Lim, S.H. Kim, S.J. Yun, C.H. Ku, S.C. Lim, J.H.Lee, "Pentacene thin-film transistors and inverters with plasma enhanced atomic-layer deposited Al2O3 gate dielectric," Thin Solid Films, Vol. 515, pp. 3132–3137, 2007.
- [111] W.T. Wondmagegn, N.T. Satyala, R.J. Pieper, "Impact of semiconductor/metal interfaces on contact resistance and operating speed of organic thin film transistors," J COMPUT ELECTRON, vol. 10, pp. 144-153, 2011.
- [112] A. Von Muhlenen, Transistors organiques ultraminces à base de pentacène, Thèse de doctorat, Ecole polytechnique fédérale de lausanne, 2007.
- [113] I. Muzikante and E.A. Silinsh, "Investigation of local trapping states in organic molecularcrystals by method of thermally modulated space-charge limited current", Acta Physica Polonica A, vol. 88, pp. 389-399, 1995.
- [114] Y. S. Yang, S. H. Kim, J. Lee, H. Y. Chu, L. Do, H. Lee, J. Oh, T. Zyung, K Ryu, and M.S. Jang, "Deep-level defect characteristics in pentacene organic thin films", Applied Physics Letters, Vol. 80, pp. 1595-1597, 2002.
- [115] R.A. Street, D. Knipp and A.R. Völkel, "Hole transport in polycrystalline pentacene transistors", Applied Physics Letters, Vol. 80, pp. 1658-1660, 2002.
- [116] J. Frenkel, "On pre-breakdown phenomena in insulator and electronic semiconductors" Physical Review, Vol. 54, P. 647–648, 1938.
- [117] L. Wang, D. Fine, D. Basu, and A. Dodabalapur. "Electric-field-dependent charge transport in organic thin-film transistors". Journal of Applied Physics, Vol. 101, pp. 1–8, 2007.
- [118] B. H. Hamadani, C. A. Richter, D. J. Gundlach, R. J. Kline, I. McCulloch, and M. Heeney. "Influence of source-drain electric field on mobility and charge transport in organic field-effect transistors" Journal of Applied Physics, Vol. 102, pp. 1–7, 2007.
- [119] B. H. Hamadani and D. Natelson. "Gated nonlinear transport in organic polymer field effect transistors" Journal of Applied Physics, Vol. 95, pp. 1227–1232, 2007.

- [120] G.-W. Kang, K.-M. Park, J.-H. Song, C. H. Lee, and D. H. Hwang, "The electrical characteristics of pentacene-based organic field-effect transistors with polymer gate insulators," Curr. Appl. Phys., Vol. 5, no. 4, pp. 297–301, 2005.
- [121] N. Koch, A. Kahn, J. Ghijsen, J. J. Pireaux, J. Schwartz, R. L. Johnson, A. Elschner, "Conjugated Organic Molecules on Metal vs. Polymer Electrodes: Demonstration of a Key Energy Level Alignment Mechanism" Appl. Phys. Lett. Vol. 82, pp. 70–72, 2003.
- [122] C. Shim, F. Maruoka, and R. Hattori, "Structural Analysis on Organic Thin-Film Transistor With Device Simulation," IEEE Trans. Electron Devices, Vol. 57, pp. 195-200, 2010.
- [123] H. Ishii, N. Hayashi et E. Ito, "Kelvin probe study of band bending at organic semiconductor/metal interfaces: examination of Fermi level alignment ", Phys. Stat. Sol, Vol. 201, no. 6, pp. 1075–1094, 2004.
- [124] A. R. Brown, C. P. Jarret, D. M. de Leeuw, M. Matters, "Field-effect transistors made from solution-processed organic semiconductors" Synthetic Metals, Vol. 88, Issue 1, pp. 37-55, 1997.
- [125] I. Benacer and Z. DIBI, "Organic Field Effect Transistor Based on Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System," submitted to International Journal.
- [126] J. W. JIN, "Modélisation physique et compacte de transistors en couches minces à base de silicium amorphe ou microcristallin" Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, université de Paris, 2012.
- [127] SPICE Models Manual, Santa Clara, CA: Silvaco Inc., 2012.
- [128] AIM-SPICE reference manual, Version 4.0a, AIM-Software, 2004.
- [129] A. Cerdeira, M. Estrada, R. García, A. Ortiz-Conde, F.J. García Sánchez, "New procedure for the extraction of basic a-Si:H TFT model parameters in the linear and saturation regions", Solid-State Electronics, vol. 45, pp. 1077-1080, 2001.
- [130] M. Estrada, A. Cerdeira, J. Puigdollers, L. Reséndiz, J. Pallares, L.F. Marzal, C. Voz, B. Iñiguez "Accurate modeling and parameter extraction method for organic TFTs", Solid-State Electronics, Vol 49, pp 1009-1016, 2005.
- [131] L. Resendiz, B. Iniguez, M. Estrada, A. Cerdeira. Modification of amorphous level 15 AIM-Spice model to include new subthreshold model. In Proceedings of International Conference on Microelectronics, IEEE, Mexico, Vol. 1, pp. 291–294, 2004.
- [132] O. Yaghmazadeh, Y. Bonnassieux, A. Saboundji, B. Geffroy, D. Tondelier, and G. Horowitz, "A SPICE-like DC model for organic thin-film transistors," J. Korean Phys. Soc, Vol. 54, no. 925, pp. 523–526, 2009.
- [133] P. Stallinga and H. L. Gomes, "Modeling electrical characteristics of thin film field-effect transistors: II: Effects of traps and impurities," Synth. Met., Vol. 156, no. 21–24, pp. 1316–1326, 2006.
- [134] B. Iñiguez, R. Picos, D. Veksler, A. Koudymov, M. S. Shur, T. Ytterdal, W. Jackson. "Universal compact model for long and short-channel thin-film transistors," Solid-State Electronics, vol. 52, no. 3, pp. 400–405, 2008.
- [135] V. O. Turin, A. V. Sedov, G. I. Zebrev, B. Iñiguez, M. S. Shur, "Intrinsic compact MOSFET model with correct account of positive differential conductance after saturation," In Proceedings of Conference on Micro- Nano-Electron, SPIE, Zvenigorod, Russia, vol. 7521, pp. 75211H-1– 75211H-9, 2009.

- [136] S. Mijalković, D. Green, A. Nejim, G. Whiting, A. Rankov, E. Smith, J. Halls, C. Murphy, "Modelling of organic field-effect transistors for technology and circuit design," In Proceedings of International Conference on Microelectron, IEEE, Niš, Serbia, pp. 469–476, 2008.
- [137] M. S. Shur, M. D. Jacunski, H. C. Slade, and M. Hack, "Analytical models for amorphoussilicon and polysilicon thin-film transistors for high-definition display technology," J. Soc. Inf. Disp., Vol. 3, pp. 223–236, 1995.
- [138] C. H. Kim, A. Castro-Carranza, M. Estrada, A. Cerdeira, Y. Bonnassieux, G. Horowitz, B. Iñiguez, "A compact model for organic field-effect transistors with improved output asymptotic behaviors," IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 60, no. 3, pp. 1136–1141, 2013.
- [139] T. Bendib, F. Djeffal, D. Arar, "Subthreshold behavior optimization of nanoscale graded channel gate stack double gate (GCGSDG) MOSFET using multi-objective genetic algorithms," Journal of Computational Electronics, Vol. 10, no. 1-2, pp. 210-215, 2011.
- [140] F. Djeffal, T. Bendib. "Multi-objective genetic algorithms based approach to optimize the electrical performances of the gate stack double gate (GSDG) MOSFET," Microelectronics Journal, Vol. 42, no. 5, pp. 661-666, 2011.
- [141] T. Bendib, F. Djeffal. "Electrical performance optimization of nanoscale double-gate MOSFETs using multiobjective genetic algorithms," IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 58, no. 11, pp. 3743-3750, 2011.
- [142] P. Moreno, R. Picos, M. Roca, E. Garcia-Moreno, B. Iñiguez, M. Estrada. "Parameter extraction method using genetic algorithms for an improved OTFT compact model," In Proceedings of IEEE International Conference on Electron Devices, Spanish, pp. 64–67, 2007.
- [143] I. Benacer and Z. DIBI, "Extracting Parameters of OFET before and after Threshold Voltage using Genetic Algorithms," International Journal of Automation and Computing, 2014.
- [144] T. Zaki, S, Scheinert, I. Horselmann, R. Rodel, F. Letzkus, H. Richter, U. Zschieschang, H. Klauk, J. N. Burghartz. "Accurate capacitance modeling and characterization of organic thin-film transistors," IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 61, no. 1, pp. 98–104, 2014.
- [145] H. Demuth, M. Beale. "Neural Network Toolbox User's Guide (module complémentaire du logiciel Matlab)". The Math Works Inc, 2006.
- [146] I. Rivals, L. Personnaz, g. Dreyfus Modélisation, classification et commande Par réseaux de neurones : principes fondamentaux, Méthodologie de conception et illustrations industrielles. Ecole Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris 2003.
- [145] I. Benacer andZ. DIBI, "Modeling and Simulation of Organic Field Effect Transistor (OFET) Using Artificial Neural Networks" International Journal of Advanced Science & Technology, vol. 66, pp. 79-88, 2014.
- [146] A. M Canuto, "Combining Neural Networks and Fuzzy Logic for Applications in Character Recognition" Thèse de doctorat, université de Kent (Canterbury), Britania, 2001.
- [147] J. S. R. Jang, "ANFIS: adaptive-network-based fuzzy inference system," IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernytics, Vol. 23 pp. 665–685, 1993.
- [148] J. S. R. Jang and C. T. Sun, "Neuro-Fuzzy Modeling and Control", Proceedings of the IEEE, Vol. 83, N°3, March 1995.
- [149] J. S. R. Jang, C. T. Sun, E. Mizutani, "Neuro Fuzzy And Soft Computing. A computational Approch to learning and Machine intelligence" Prentice Hall, 1997.

- [150] F. Djeffal, M. Chahdi, A. Benhaya, M.L. Hafiane, "An approach based on neural computation to simulate the nanoscale CMOS circuits: Application to the simulation of CMOS inverter," Solid-State Electronics, Vol. 51, pp. 48-56, 2007.
- [151] F. Djeffal, "Modélisation et simulation prédictive du transistor MOSFET fortement submicronique. Application à la conception des dispositifs intégrés," Thèse de doctorat, université de Batna, 2006.
- [152] P. W. Tuinenga, "SPICE, guide pour l'analyse et la simulation de circuits avec PSPICE", Masson de Paris, Prentice Hall London, 1994.
- [153] M. Sze Simon, K. Ng Kwok, "Physics of semiconductor devices", Ed. John Wiley and Sons (3ème édition), ISBN-13: 978-0471143239, 2006.