REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

یر *ال*براهبم

Université de Mohamed El-Bachir El-Ibrahimi - Bordj Bou Arreridj

Faculté des Sciences et de la technologie

Département d'Electronique



Présenté pour obtenir

LE DIPLOME DE MASTER

FILIERE : ELECTRONIQUE

Spécialité : Microélectronique

Par

Radjai Foudil

Mekhalfia Wassil

Intitulé

Modélisation du transistor FET à base de semiconducteurs organiques

Soutenu le :

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom

Université Mohamet El Bachir El Ibrahimi - B.B.A -

Dr Abdelouahab Djemouai

M^{me} Fadila Kherrat

Dr Zitouni Messai

Dr Zine-eddine Touati

Qualité

Examinatrice

Co-encadrant

Président

Encadreur

Etablissement

Université de B. Bou Arreridj Université de B. Bou Arreridj Université de B. Bou Arreridj Université de B. Bou Arreridj

Université Mohamed El Bachir El Ibrahimi - B.B.A -

Année Universitaire 2019/2020

Dédícace

Nous dédions ce modeste travail Fruit de plusieurs mois de patience A Nos chères mères symbole de tendresse A Nos chers pères symbole de sacrifice, A Toute Nos familles et tous Nos collègues, A Nos enseignants, lumières de nos chemins.

Foudíl & Wassíl

Remerciements

Avant tout, nous remercions Allah le tout-puissant qui nous a donnés la force pour réaliser cet ouvrage que nous souhaitons qu'il atteigne nos espérances.

Ce travail a été réalisé à Université de Mohamed El-Bachir El-Ibrahimi -Bordj Bou Arreridj.

Je tiens à remercier en premier lieu, mon encadreur, **Dr Zitouni Messai**, et mon co-encadreur **Dr TOUATI Zine-eddine**. Je les remercie de m'avoir accueillie et de m'avoir très vite encouragée à participer à des échanges scientifiques. Leurs grandes disponibilités, leurs rigueurs scientifiques, leur enthousiasme, leur patience et leurs précieux conseils m'ont permis de travailler dans les meilleures conditions.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mes sincères remerciements à **Dr Abdelouahab Djemouai**, qui m'a fait l'honneur d'accepter la présidence du jury de cette mémoire.

Je tiens également à remercier vivement les membres du jury : Mme Fadila Kherrat. Pour avoir accepté d'évaluer ce travail.

Je n'oublierai pas la contribution de mes collègues et mes amis de m'avoir encouragé et de me soutenir moralement durant toute la période de sa préparation.

ملخص:

ان استخدام المواد العضوية كمواد نشطة يمثل الجيل القادم من التكنولوجيا. نظرا لما تتمتع به من مرونة و تكلفة انتاج زهيدة و قد عزز هذا الجيل الجديد الأبحاث حول الترنزستورات العضوية تحت تأثير الحقل المغناطيسي .و على الرغم من التطور الا ان الترنزيستور العضوي مزال يواجه العديد من النقائص لذلك تعد نموذجة المركبات الاليكترونية العضوية تشكل محور أبحاث هامة مستقطبة يتعلق هذا العمل بمحاكاة الترانزستور العضوي ، والهدف من هذا العمل هو دراسة الترانزستورات ذات الأغشية الرقيقة العضوية ودراسة تأثير تغيير الابعاد المختلفة للمناطق الحرجة على خصائصها الكهربائية من خلال العضوية ودراسة تأثير تغيير الابعاد المختلفة للمناطق الحرجة على خصائصها الكهربائية من خلال تحسين أحجام المناطق الحرجة للجهاز على وجه الخصوص طول القناة ، و عرض القناة وكذلك سمك أكسيد البوابة ، كما تم إجراء دراسة تأثير هذه المعلمات لعتبة الجهد ، والمنحدر الفرعي ، والأيونات ، والموصلية القصوى. تم تطوير نموذج فيزيائي ثنائي الأبعاد لـ OFET باستخدام برنامج SILVACO (ATLAS). تم توضيح ومناقشة القيم المثلى لكل محاكاة بيانياً. تظهر النتائج التي تم الحسول عليها والتوقعات فائدة وجود أدوات النمذجة المتلى لكل محاكاة بيانياً. تنهم المتائية التي تم الحسول عليها والتوقعات فائدة وجود أدوات النمذجة المتلى لكل محاكاة بيانياً. تظهر النتائج التي تم الحصول عليها والتوقعات فائدة وجود أدوات النمذجة المتاحة لتطوير مكونات أو أجهزة عالية الأداء تستند إلى OFETs.

كلمات مفتاحية: انصاف النواقل العضوية، ترانزستور تحت تأثير المجال المغناطيسي (OFET)، SILVACO (ATLAS) ، جهد العتبة ، منحدر العتبة الفرعية ، GMAX ، Ion.

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 simulation du transistor organique, Le but de Ce travail est l'étude des transistors organiques à couches minces et de l'impact de différentes tailles de régions critiques sur leurs caractéristiques électriques. En optimisant les tailles de régions critiques du dispositif, la longueur du canal, la largeur du canal et également l'épaisseur de l'oxyde de grille. En particulier, l'étude de l'impact de ces paramètres pour la tension de seuil, Subthreshold Slope, Ion et transconductance maximale a été réalisée. Un modèle physique bidimensionnel d'OFET a été développé à l'aide du logiciel SILVACO (ATLAS). Les valeurs optimales de chaque simulation sont illustrées graphiquement et discutées. 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. Enfin, une conclusion pour notre simulation est présentée.

Mots clé : Semi-conducteurs organiques SCO, transistor à effet de champ (OFET), SILVACO (ATLAS), tension de seuil, pente sous-seuil, ion, GMAX.

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. The purpose of this thesis is the study of organic thin film transistors and the impact of different critical region sizes in their electrical characteristics. The simulation was based on models and parameters similar to those of previous simulations in Organic Thin Film Transistors. By optimizing critical region sizes of the device, channel length, channel width and also the gate oxide thickness are changed in order to have optimum transistor performance. Especially, the investigation of the impact of these parameters for the threshold voltage, Subthreshold Slope, Ion and maximum transconductance was been done. A twodimensional physical model of OFET was developed using the SILVACO software (ATLAS). In addition, the optimum values for each simulation are illustrated graphically and discussed. Finally, a conclusion for our simulation is presented.

Keywords: Organic semiconductors OSC, Field Effect Transistor (OFET), SILVACO (ATLAS), threshold voltage, Subthreshold Slope, Ion, _{GMAX}.

Liste des abréviations :

SCO	semi-conducteur organique
OLED	Diodes électroluminescentes organiques
LCD	Liquid Crystal Display
FET	Field Effect Transistor
OPV	Les cellules photovoltaïques organiques
OFET	Les transistors organiques à effet de champ
RFID	radio frequency identification tags
VFB	le potentiel de bandes plates
PPV	para-phénylène vinylène
EQE	rendement quantique externe
PhC12	hexaphenyl-substitutes hexabenzocorone
CAO	Conception Assistée par Ordinateur
CW	Continuous Wave
DC	Courant continu
DD	Dérive-Diffusion
FET	Field Effect Transistor
Fint	Les champs électriques internes
MOS	Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor
SILVACO	Silicon Valley Corporation
TCAD	Technology Computer Aided Design.

Liste des symboles :

μ_n, μ_p	Mobilité des électrons, trous	cm ² /Vs
f	Fréquence	Hz
Gm	Transconductance	S (Ω-1)
I _{DS} , I _D	Courant drain-source	А
I _{Dsat}	Courant drain-source à la saturation ($V_{ds} = V_{dsat}$)	А
I _{GD}	Courant grille-drain	А
I _{GS}	Courant grille-source	А
k	Constante de BOLTZMANN (k = 1.38×10^{23} J.K ⁻¹)	J.K ⁻¹
q	Charge élémentaire d'électrons	С
Т	Température	K°
V_{BD}	Tension de claquage	V
V _{DS}	Différence de potentiel drain-source	V
Vg	Tension de polarisation appliquée à la grille	V
V_{GD}	Différence de potentiel grille-drain	V
V _{GS}	Différence de potentiel grille-source	V
vsat	Vitesse de saturation	cm/s
V_{TH}, V_T	Tension de seuil	V
εr	La permittivité relative	
κ	La conductivité thermique	W/K.cm
SS :	Pente sous le seuil	
RC	Résistance de contact	
W	Largeur du canal conducteur	
L	Longueur du canal conducteur	
IOn/IOff:	Rapport des courants ON et OFF	
Von	Swith-on Voltage - Tension d'allumage	

Table des matières :

ملخص	I
Résumé	II
Abstract	III
Liste des abréviations	IV
Liste des symboles	V
Table des matières	VI
Liste des Figures	VIII
Introduction générale	

Chapitre I : Généralités sur les semiconducteurs organiques

I.1. Introduction :
I.2. Les Semi-conducteurs organiques :
I.2.1. Définition :
I.2.2. Types de Semi-conducteurs organiques :
I.2.3. Dépôt du semi-conducteur organique :7
I.3. Différences fondamentales semi-conducteurs organiques-inorganiques :7
I.3.1. Forces d'interactions :
I.3.2. Effet de polarisation dans les semi-conducteurs organiques :
I.4. Applications des semi-conducteur organique :
I.5. Une vue simple du schéma de bandes d'un semi-conducteur organique :11
I.6. Structure électronique des semi-conducteurs organiques :
I.6.1. Phénomène de conjugaison et structure électronique des matériaux conjugués :13
I.7. Origine des états localisés dans les SCO :
I.7.1. Pièges électroniques :
I.8. Avantages et inconvénient :
I.8.1. Les avantages :
I.8.2. Les inconvénients:
I.9. Conclusion :

Chapitre II : Les transistors organiques à effet de champ (OFET)

II.1. Introduction :	19
II.2. Structure et Principe de fonctionnement des OFETs :	20
II.3. Généralités sur les transistors organiques à effet de champ :	22
II.3.1. Géométries des transistors organique à effet de champ :	22
II.3.2. Les différentes géométries possibles :	23
II.4. Les différents régimes en fonction de VDS et VGS :	25
II.4.1. OFET à canal de type n :	25
II.4.2. OFET à canal de type p :	26
II.5. Paramètres électriques issus de la caractérisation	27
II.5.1. Mobilité à effet de champs (µFE) :	27
II.5.2. Tension de seuil (VTH) et de démarrage (Von) :	28
II.5.3. Pente sous le seuil (SS) :	30
II.6. Analyse du besoin pour le transistor organique :	31
II.7. Conclusion :	32

Chapitre III : Simulation du transistor organique par TCAD

III.1. Introduction :	.34
III.2. Présentation d'ATLAS :	.34
III.3. Simulation et caractérisation du transistors OFET :	.35
III.3.1. Description de la structure simulée	.35
III.3.2. Caractéristique de sortie IDS (VDS) et caractéristiques de transfert IDS (VGS):	.38
III.4. Etude de l'influence des paramètres technologiques :	.40
III.4.1. Effet de la Longueur et la largeur de la grille sur les caractéristiques de transfert :	.41
III.4.2. Effet de la Longueur et la largeur de la grille sur la tension du seuil :	.42
III.4.3. Effet de la Longueur et la largeur de la grille sur la pente sous le seuil (SS) :	.43
III.4.4. Effet de la Longueur et la largeur de la grille sur ION :	.44
III.4.5. Effet de la Longueur et la largeur de la grille sur GMAX :	.45
III.5. Conclusion :	.47
Conclusion Générale :	.49
Références bibliographiques	.50

Liste des figures :

Figure I.1. Représentation des deux modèles de base des structures moléculaires
fonctionnalisées. a) : un polymère largement utilisé dans les transistors organiques, le P3HT
(poly (3-hexylthiophène) ; semi-conducteur type p \mathbf{b}) : une petite molécule, le pentacène avec
cinq cycles de benzène, semi-conducteur de type p6
Figure I.2. Diagramme d'énergie d'un atome, d'un cristal inorganique, d'une molécule, d'un
solide moléculaire – Extrait
Figure I.3. Applications des Semi-conducteurs organiques11
Figure I.4. Fonction d'onde d'un électron suivant la variable d'espace z12
Figure I.5. a) schéma des orbitales et liaisons de l'éthylène ; b) digramme énergétique de la
liaison carbone-carbone dans le cas d'une hybridation sp2 ; c) schéma des orbitales du
benzène – adaptés14
Figure I.6. a) Digramme énergétique de la famille des polyacènes ; b) Surface d'énergie
potentiel pour un système conjugué non-dégénéré de polythiophéne ; c) exciton-polaron sur
une chaine linéaire de polythiophènes15
Figure II.1. a) Structure d'un transistor organique en configuration grille basse/contacts bas
composé de trois électrodes (source, drain et grille), d'un diélectrique et d'un semi-conducteur
; b) vu de dessus du transistor : les dimensions du canal sont représentées avec W la largeur et
L la longueur
Figure II 2 Structure Métal-Isolant-Semi-conducteur (type n) idéale (Wm -WS) sous
Figure 1.2. Structure Metal-Isolant-Semi-conducteur (type ii) Ideale (Will = WS) sous
polarisation avec différents régimes : a) déplétion, b) bandes plates, c) accumulation
polarisation avec différents régimes : a) déplétion, b) bandes plates, c) accumulation
 Figure II.2. Structure inetal-isolant-Semi-Conducted (type in) ideale (win = ws) sous polarisation avec différents régimes : a) déplétion, b) bandes plates, c) accumulation
 Figure II.2. Structure interference (type in) interference
 Figure II.2. Structure inetal-isolant-Semi-Conducteur (type in) ideale (win = ws) isols polarisation avec différents régimes : a) déplétion, b) bandes plates, c) accumulation
 Figure II.2. Sudduire inetal-isolant-Semi-Conducted (type in) ideale (type in) ide
 Figure II.2. Sudduire inetal-isolant-Semi-Conducted (type in) ideale (type in) ide
 Figure II.2. Structure 'Medal-Isolant-Schlie-Schliebenheiten' (type II) 'Ideale' (Will = WS)' solas polarisation avec différents régimes : a) déplétion, b) bandes plates, c) accumulation
 Figure II.2. Structure inetal-isolant-Semi-Conducted (type ii) ideate (will = ws) sols polarisation avec différents régimes : a) déplétion, b) bandes plates, c) accumulation
 Figure II.2. Subtruite interarisonal-Solal-So
 Figure II.2. Structure Area intersonane sonale sonale conducteur (type in) ideate (with 2 wis) sods polarisation avec différents régimes : a) déplétion, b) bandes plates, c) accumulation

linéaire ; b) début du régime saturé au pincement du canal ; c) régime saturé : le point de
pincement du canal se déplace vers la source quand VDS augmente - Les figures de droite
représentent la caractéristique $ID = f(VDS)$ correspondantes au schéma de gauche26
Figure II.7. a) extraction des paramètres électriques en régime linéaire à partir de la courbe
de transfert en échelle semi-logarithmique et linéaire ; b) caractéristique de sortie d'un
$transistor \ de \ type \ n-la \ tension \ de \ transition(VTR) \ et \ le \ courant \ de \ drain \ saturé(IDSAT) \ sont$
extrait à VGS donnée pour évaluer la résistance de contact RC29
Figure III.1.Entrées/sorties du simulateur Atlas
Figure III.2. Structure générale du transistor. 36
Figure III.3. Configuration du potentielle dans la fonction initiale
Figure III.4. Configuration du potentiel en fonction de haute tension
Figure III.5. Configuration de champ électrique en fonction initiale
Figure III.6. Configuration du champ électrique en fonction haute tension
Figure III.7. Caractéristique de transfert IDS-VGS à l'échelle linéaire-linéaire
Figure III.8. Caractéristique de transfert IDS-VGS à l'échelle logarithmique-linéaire
Figure III.9. Caractéristiques de sortie IDS-VDS du OFET40
Figure III.10. Influence de la longueur de grille « L » sur les caractéristiques I-V41
Figure III.11. Influence de la largeur de grille « W » sur les caractéristiques I-V41
Figure III.12. Tension de seuil pour différentes longueurs de canal42
Figure III.13. Tension de seuil pour différentes largeurs de canal
Figure III.14. Pente du sous-seuil pour différentes longueurs
Figure III.15. Pente sous-seuil pour différentes largeurs
Figure III.16. I _{ON} pour différentes longueurs de canal45
Figure III.17. Ion pour différentes largeurs de canal45
Figure III.18. Gmax pour différentes longueurs de canal46
Figure III.19. Gmax pour différentes largeurs de canal

Introduction générale

Introduction générale :

L'électronique organique est un domaine de la science des matériaux comprenant le design, la synthèse, la caractérisation et l'utilisation de petites molécules ou polymères organiques qui présentent des propriétés électroniques souhaitables comme la conductivité [1]. Contrairement aux conducteurs et semi - conducteurs inorganiques conventionnels, les matériaux électroniques organiques sont constitués de petites molécules ou de polymères organiques. Des stratégies de synthèse pour ces matériaux ont été développées à partir de la chimie organique et des polymères. L'un des avantages espérés de l'électronique organique est son faible coût par rapport à l'électronique traditionnelle. Les propriétés intéressantes des polymères conducteurs incluent leur conductivité électrique qui peut être modifiée par la concentration de dopants [2]. Par rapport aux métaux, ils ont une flexibilité mécanique. Certains ont une stabilité thermique élevée. Les domaines d'application de ces composants sont très variés allant de la télécommunication (réception satellite, téléphonie...) à l'automobile (radar...) en passant par l'informatique (processeur...).

En ce qui concerne l'électronique organique, les conducteurs électriques sont une classe de matériaux d'intérêt. Les conducteurs électriques organiques sont des matériaux pouvant transmettre des charges électriques avec une faible résistivité [3]. Traditionnellement, les matériaux conducteurs sont inorganiques. Ces matériaux conducteurs, et toujours majoritairement utilisés en électronique, sont les métaux tels que le cuivre et l'aluminium ainsi que de nombreux alliages

En 1862, Henry Letheby découvre le premier matériau conducteur organique, la polyaniline. Ce n'est qu'un siècle plus tard, dans les années 1960 que les travaux sur d'autres matériaux organiques polymériques ont commencés sérieusement [4]. En 1977, il a été découvert que le polyacétylène peut être oxydé avec des halogènes pour produire des matériaux conducteurs à partir de matériaux isolants ou semi - conducteurs. Le prix Nobel de chimie de 2000 a été décerné à Alan J. Heeger, Alan G. MacDiarmid et Hideki Shirakawa pour leurs travaux sur les polymères conducteurs [5]. Ces chercheurs et de nombreux autres ont identifié de grandes familles de polymères électriquement conducteurs, notamment le polythiophène le sulfure de polyphénylène et d'autres.

La première description des propriétés de base des diodes électroluminescentes en polymères a été rapportée par Bradley [6], Burroughes, Friend et des associés en 1990 dans un article de Nature démontrant que le phénomène d'émission de lumière était l'électroluminescence par injection et que la réponse en fréquence était suffisamment rapide

2

pour permettre des applications d'affichage vidéo. Le passage des matériaux moléculaires aux matériaux macromoléculaires a résolu les problèmes rencontrés précédemment avec la stabilité à long terme des films organiques et a permis de réaliser facilement des films de haute qualité. Des recherches ultérieures ont développé des polymères multicouches. Le nouveau domaine de l'électronique plastique, les recherches sur les diodes électroluminescentes organiques (OLED) et la production de dispositifs sont en forte croissance. Ce développement des dispositifs a dynamisé la recherche autour des transistors organiques à effet de champs (OFET) [7].

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.

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.

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.

Le deuxième chapitre, nous 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 inorganiques et le modèle de caractérisation des MOSFET utilisé pour décrire le fonctionnement des OFET présente des limites.

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.

3

Chapitre I : Généralités sur les semiconducteurs organiques

I.1. Introduction :

L'électronique organique est une branche de l'électronique utilisant des composés arborés possédant des propriétés semi-conductrices, se différenciant ainsi de l'électronique traditionnelle à base de composés inorganiques (Silicium, Germanium, etc....) [8, 9]. Lorsqu'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 [8]. 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 [8, 10].

I.2. Les Semi-conducteurs organiques :

I.2.1. Définition :

Un semi-conducteur organique est un composé organique, sous la forme d'un cristal ou d'un polymère, qui montre des propriétés similaires aux semi-conducteurs inorganiques. Ses propriétés sont la conduction par les électrons et les trous, ainsi que la présence d'une bande interdite. Ces matériaux ont donné naissance à l'électronique organique, ou électronique des plastiques. Par organique, on entend que les molécules utilisées sont à base de carbone, comme les molécules à la base de la vie [10]. On dit organique par opposition aux semiconducteurs inorganiques, tels le silicium, ou aux conducteurs inorganiques, comme le cuivre.

I.2.2. Types de Semi-conducteurs organiques :

Les semi-conducteurs organiques se distinguent en deux catégories : les petites molécules et les polymères. Ce sont des systèmes pi-conjugués : ils présentent une alternance de liaisons simples et doubles qui est à l'origine du caractère semi-conducteur. La différence majeure entre ces deux types de matériaux provient de la taille de la molécule [11].

Un polymère est une macromolécule dont la structure élémentaire, le monomère, se répète N fois. Les petites molécules ne sont, quant à elles, constituées que d'un seul monomère et ont une faible masse molaire (< 1000 g.mol-1). De fait, elles ont une structure bien définie avec une masse moléculaire précise contrairement aux polymères. Entre les deux, on trouve les oligomères qui ont une structure périodique mais ne possède que quelques monomères [11].

Le transport des charges dans ces deux familles de semi-conducteurs est effectué de manière identique mais leur synthèse et technique de dépôt peuvent différer.

Grâce à leur faible masse moléculaire, les petites molécules sont généralement déposées par évaporation sous vide, et ont tendance à cristalliser pendant le dépôt, ce qui peut favoriser le transport des charges dans le semi-conducteur organique [12]. En revanche cela peut aussi entraîner une morphologie rugueuse ne recouvrant pas toute la surface du substrat. Les petites molécules peuvent néanmoins, pour certaines, être solubles, s'il y a ajout de ramifications (ou substituants) [13], dans un solvant spécifique et ainsi être déposées par voie liquide.

Les polymères ont une masse moléculaire trop élevée pour être déposés par évaporation sous vide. La plupart d'entre eux sont solubles, ils peuvent donc être déposés par des procédés en voie liquide [14] comme le dépôt à la tournette [15], l'impression jet d'encre [16] ou encore la sérigraphie [17]. Ces techniques de fabrication simples et rapides confèrent un grand intérêt aux polymères.

Les mobilités des porteurs de charges reportées dans la littérature, que nous définirons par μ ou μp et μn dans les cas respectifs des porteurs de charges positifs (trous) et négatifs (électrons), sont de l'ordre de 10 cm².V⁻¹.s⁻¹ pour les petites molécules à canal p [18], [19] et de 1 cm².V⁻¹.s⁻¹ dans le cas des polymères à canal p [20, 21] même si certaines études montrent des μp au-delà de 10 cm².V⁻¹.s⁻¹.[22, 23]

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

- ✓ Les polymères (a)
- ✓ Les petites molécules (b)



Figure I.1. Représentation des deux modèles de base des structures moléculaires
fonctionnalisées. a) : un polymère largement utilisé dans les transistors organiques, le
P3HT (poly (3-hexylthiophène) ; semi-conducteur type p b) : une petite molécule, le
pentacène avec cinq cycles de benzène, semi-conducteur de type p.

I.2.3. Dépôt du semi-conducteur organique :

Le verre moléculaire est déposé par spin coating à partir d'une solution à 200 mg /mL dans le chlorobenzène. Des additifs sont ajoutés pour augmenter la mobilité du verre et limiter les recombinaisons entre le TiO_2 et le verre moléculaire. Les additifs généralement utilisés sont : les sels de Lithium, les sels d'antimoines, le *ter*-butylpyridine [24]. Les proportions d'additifs utilisés sont les suivantes :

- Ter-butylpyridine (Aldrich) : verre moléculaire (1:57) en volume
- LiTFSi (Aldrich) : verre moléculaire (1 :27) en volume, à partir d'une solution de LiTFSi à 190 mg/mL dans l'acétonitrile

Le mélange verre moléculaire et additifs est laissé sous agitation pendant plusieurs heures afin d'avoir une solution homogène [25]. Le chauffage est parfois nécessaire pour obtenir une meilleure solubilité. Les paramètres du dépôt par spin coating sont les suivants :

- 20 à 30 μ L de solution
- Temps d'attente 40s, pour permettre la pénétration du verre dans les pores du TiO2
- Vitesse 2000 tr/min, temps 45s, accélération 7500 tr.min-2

I.3. Différences fondamentales semi-conducteurs organiques-inorganiques :

I.3.1. Forces d'interactions :

Une des principales différences entre les semi-conducteurs inorganiques et organiques réside dans la structure atomique des matériaux [26]. Dans un cristal inorganique, les atomes constituent un réseau géométrique régulier dont le motif élémentaire se répète de façon périodique à grande échelle. Ainsi, les atomes sont liés par des liaisons covalentes fortes (318 kJ/mol pour le silicium) permettant la délocalisation des électrons sur l'ensemble du cristal. Les cristaux ou films minces de semi-conducteurs organiques sont, quant à eux, composés d'un assemblage de molécules, elles-mêmes constituées d'atomes. Alors que les liaisons intramoléculaires sont fortes, les liaisons intermoléculaires sont de type de Van der Waals et présentent des énergies inférieures à 40 kJ/mol [26].



Figure I.2. Diagramme d'énergie d'un atome, d'un cristal inorganique, d'une molécule, d'un solide moléculaire – Extrait

Cette différence de forces d'interactions à une implication au niveau de la largeur des bandes d'énergie qui correspond à la densité d'états électroniques disponibles (DOS). La Figure (I.2) résume l'origine de la formation des bandes électroniques dans les cristaux inorganiques et organiques. Pour le cristal inorganique, le fort couplage entre atomes conduit à des largeurs W de bandes de valence (BV) et de conduction (BC) comprises entre 5 et 10 eV. Dans l'hypothèse d'une absence de désordre, les états sont délocalisés sur l'ensemble du cristal. Dans le cas des cristaux organiques, les faibles couplages des orbitales des molécules adjacentes se traduit par des largeurs d'HOMO et LUMO étroites allant de 0,1 à 0,5 eV. La largeur des bandes va donc dépendre de l'efficacité du recouvrement orbitélaire qui est luimême tributaire de la distance intermoléculaire.

I.3.2. Effet de polarisation dans les semi-conducteurs organiques :

L'ajout d'une charge dans un solide va entrainer une polarisation de l'environnement. Cette polarisation peut s'étendre à diverses échelles dans le matériau. On peut essentiellement distinguer trois types de polarisation:

 La polarisation électronique correspond à la déformation du nuage électronique avec la création d'un dipôle électrique. Pour les semi-conducteurs organiques, le champ électrique créé par la charge induit un déplacement des électrons pi voisins.

- La polarisation moléculaire découle de la polarisation électronique et est associée aux déplacements des noyaux atomiques de la molécule (vibrations de la molécule).
- La polarisation du réseau correspondant au réarrangement géométrique des molécules environnantes. Cette dernière polarisation ne se produit pratiquement jamais dans les solides organiques et sera négligée dans la suite de ce paragraphe.

Une question peut alors se poser : dans quelles conditions ces polarisations apparaissentelles ? En fait, cela va dépendre des valeurs respectives de la vitesse des charges et de la polarisation. Il est donc nécessaire de définir les temps et énergies caractéristiques de ces phénomènes qui sont reliés par la relation d'Heisenberg [26]. On peut tout d'abord introduire le temps de résidence τr de la charge sur une molécule:

$$\tau_r = \frac{h}{J} = \frac{h}{W} \tag{I.1}$$

Avec \hbar la constante de Plank réduite, J l'intégrale de transfert qui traduit le recouvrement orbitélaire entres molécules. Cette intégrale mesure donc la force de la liaison et peut être reliée à la largeur de bande d'énergie W. Une valeur importante de J va favoriser un transport efficace entre molécules. Avec les largeurs de bandes définies dans le paraphe précédent, on obtient des temps de résidence de l'ordre de 10 -14 secondes pour les semi-conducteurs organiques et 10 -16 secondes pour les semi-conducteurs inorganiques.

Il faut ensuite définir les temps de polarisation électronique (τe) et moléculaire (τm) qui sont respectivement le temps nécessaire à la déformation du nuage électronique, et le temps nécessaire pour que la molécule change de configuration géométrique. Ainsi :

$$\tau_e = \frac{h}{\Delta E_{ex}} \tag{I.2}$$

$$\tau_m = \frac{h}{\Delta E_{vib}} = \frac{2\pi}{w_0} \tag{I.3}$$

Avec ΔEex l'énergie d'excitation égale à la transition HOMO/LUMO (BV/BC) et $\Delta Evib$ l'énergie vibrationnelle associée à la fréquence propre de vibration des molécules. Ainsi, pour des gaps de semi-conducteur allant de 1 à 2 eV, on obtient des temps de polarisation électronique de l'ordre de 10 -15 secondes. D'autre part, des énergies de vibrations caractéristiques aux alentours de 0,1 - 0,2 eV donnent des temps de polarisation moléculaires de l'ordre de 10 -14 secondes [26].

En comparant les temps caractéristiques, $\tau r < \tau e$, τm dans les semi-conducteurs inorganiques pendant que $\tau e < \tau r \approx \tau m$ pour les matériaux organiques conjugués. Ainsi pour

les matériaux inorganiques, la charge se déplace trop rapidement pour que les atomes voisins se polarisent. Pour les matériaux organiques conjugués, le temps de réaction du nuage de polarisation est bien inférieur au temps nécessaire pour transférer la charge. La charge, écrantée par les nuages électroniques polarisés, voit donc son potentiel diminuer, ce qui induit une stabilisation énergétique et une faible localisation de l'état électronique [27]. La charge couplée à la déformation du nuage électronique est appelée polaron coulombien [7, 26].

La situation pour la polarisation moléculaire dépend du semi-conducteur. Si on fait l'hypothèse que le changement de conformation de la molécule (vibration) est plus rapide que le transfert de charge, la déformation moléculaire aura lieu. Le changement de distribution électronique (polarisation électronique), dû à la présence de la charge, conduit effectivement à un réajustement de la longueur de liaison, accompagné d'une relaxation de la molécule. Cette relaxation structurale peut être référée au couplage électrons-phonons (phonons = états vibrationnels quantifiés). Cela veut simplement dire qu'il y a une dépendance entre la distribution électronique et la distance entre les atomes. Comme les électrons constituent la liaison, une modification de leur distribution spatiale va entrainer le réarrangement des atomes. Ce phénomène de relaxation mène à une diminution d'énergie de la molécule et donc à un auto-piégeage de la charge dans un état localisé. Le polaron moléculaire est donc une charge accompagnée de la déformation géométrique qu'elle induit dans son entourage [2, 26].

Enfin, il a été montré que la polarisation électronique et moléculaire conduise toutes les deux à une diminution de l'intégrale de transfert.

I.4. Applications des semi-conducteur organique :

Les semi-conducteurs organiques sont utilisés dans le domaine de l'optoélectronique pour le développement de :

- diodes électroluminescentes organiques (OLED, Organic Light Emitting Diode) avec lesquelles on peut fabriquer des dispositifs d'affichage concurrents des LCD (Liquid Crystal Display) actuels. La matrice de pixels rouges, verts et bleus est facilement fabriquée soit par une technique d'évaporation sous vide, soit à l'aide de la technique d'impression à jet d'encre.
- cellules solaires .
- transistors à effet de champ ou FET (Field Effect Transistor).
- Fenêtres intelligentes qui s'obscurcissent lorsqu'il y a trop de soleil. On se sert déjà de cette technique pour faire des verres de lunettes qui s'obscurcissent lorsqu'on va à l'extérieur.



• papier électronique (e-paper).

Figure I.3. Applications des Semi-conducteurs organiques

I.5. Une vue simple du schéma de bandes d'un semi-conducteur organique :

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. Les diodes et les transistors à la base de l'électronique moderne sont constitués de matériaux semiconducteurs [28]. Jusqu'aux années 1950, 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.

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. Les électrons y sont délocalisés, ce qui permet le transport de charges à

travers la molécule. Les liaisons carbone-carbone, dites covalentes, lient deux atomes identiques et résultent d'un partage des électrons de valence qui se répartissent alors sur des orbitales moléculaires communes aux deux atomes. On admet couramment que ces liaisons moléculaires s'obtiennent par superposition des orbitales atomiques ; plus précisément, les fonctions d'onde dont elles résultent sont obtenues par combinaison linéaire des fonctions d'onde atomiques (LCAO, Linear Combination of Atomic Orbitals).

L'orbitale électronique est la manifestation physique de la présence dans l'espace d'un ou de plusieurs électrons d'un niveau d'énergie donné. Elle est mathématiquement décrite par la densité de probabilité de présence p [x, y, z] de cet ou de ces électrons dans l'espace.

Etant donné que cette fonction est souvent faiblement convergente pour une des trois variables d'espace ou les trois tendant vers l'infini, on procède par troncature en définissant le volume à l'intérieur duquel on a 90% de chance de trouver cet ou ces électrons.



Figure I.4. Fonction d'onde d'un électron suivant la variable d'espace z.

Ainsi L'équation différentielle est du second ordre. Elle admet classiquement deux solutions pour E, correspondant à une énergie liante (négative) et une antiliante (positive) dans le cas d'un électron. Lorsque on se trouve dans un solide où un grand nombre d'électrons est concerné, il y a autant d'équations que d'électrons, et ces équations sont couplées entre elles.

Mathématiquement, et physiquement, on ne sait pas résoudre (on ne sait pas aller au-delà de trois corps c'est-à-dire qu'il est impossible de calculer par la mécanique quantique : l'énergie, la localisation dans le temps et la localisation dans l'espace en même temps). Seules des méthodes quantiques d'approximations de chimie permettent dans certains cas de résoudre le problème. Lorsque deux orbitales atomiques s'associent, elles donnent naissance à deux orbitales moléculaires dont les fonctions d'onde sont complexes conjuguées l'une de l'autre. Qu'il s'agisse d'électrons σ ou d'électrons π , on obtient une énergie (figure I.4) :

• Positive, correspondant à l'orbitale anti-liante. Elle forme l'équivalent de la bande de conduction, la bande LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital): EL.

• Négative, correspondant à l'orbitale liante. Elle forme l'équivalent de la bande de valence, la bande HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) : EH L'écart entre ces deux niveaux définit l'équivalent d'une bande interdite (band gap): Eg.

I.6. Structure électronique des semi-conducteurs organiques :

I.6.1. Phénomène de conjugaison et structure électronique des matériaux conjugués :

L'atome de carbone est l'élément de base des semi-conducteurs organiques. Il est donc important d'expliciter sa structure électronique, qui est à l'origine de la formation des systèmes conjugués. Cet élément, situé dans la colonne IVA du tableau périodique, possède une configuration électronique (1s)2(2s)2(2p)2 à l'état fondamental [29]. Pour réaliser des liaisons interatomiques, les orbitales s et p vont se mélanger pour former de nouvelles orbitales hybrides sp, sp2 et sp3. Dans le cas de l'éthylène (Figure I.5, a et b), le carbone triplement lié adopte une configuration sp2, dans laquelle les orbitales px et py se combinent à l'orbitale 2s. Le recouvrement axial des orbitales hybrides sp2 des atomes adjacents donne lieu à la formation des orbitales moléculaires σ - et σ +, dites liaisons σ . Cette liaison covalente très stable forme le squelette de la molécule ($\approx 400 \text{ kJ/mol}$) et évite la dénaturation de la molécule lors des procédés d'injection de charges ou de formation d'excitons. Le recouvrement latéral des orbitales pz des deux carbones voisins forme, quant à lui, des orbitales moléculaires π - et π +, dites liaisons π (\approx 150-250 kJ/mol). Le doublet d'électrons partagé dans la double liaison (électrons π) est placé dans l'orbitale moléculaire liante car elle est la plus stable. En raison du fort recouvrement axial, l'écart énergétique entre les orbitales σ - et σ + est plus important par rapport à celui des orbitales π - et π +, pour lesquelles le recouvrement latéral est moins efficace. Lorsque les atomes voisins possèdent eux aussi une orbitale non hybridée pz, comme pour le benzène (Figure I.5, c), chaque orbitale pz se recouvre latéralement avec ses deux voisines et les électrons π correspondants ne peuvent pas être assignés à un atome en particulier [30]. Un système d'orbitales π délocalisées se crée le long de la chaine carbonée, c'est le phénomène de conjugaison.



Figure I.5. a) schéma des orbitales et liaisons de l'éthylène ; b) digramme énergétique de la liaison carbone-carbone dans le cas d'une hybridation sp2 ; c) schéma des orbitales du benzène – adaptés.

Concernant les polymères, oligomères ou petite molécules conjuguées, la conjugaison s'étend sur un nombre plus important d'atomes ou d'unités monomères. Nous pouvons citer l'exemple des hydrocarbures polycycliques aromatiques (FigureI.5, a). Lorsque l'on passe du benzène au pentacène, le nombre d'orbitales atomiques impliquées dans la formation des orbitales moléculaires est de plus en plus grand et conduit à une diminution de l'écart énergétique (ΔE) entre le dernier niveau liant occupé (HOMO) et le premier niveau anti-liant inoccupé (LUMO). De manière similaire au problème de la boîte quantique 1D ($\Delta E \alpha 1/LC$), une extension de la longueur de conjugaison (LC) implique une diminution de l'écart énergétique entre les niveaux HOMO et LUMO. Cette différence est appelée « gap » du composé organique.

Ainsi, dans le cas idéal d'un polymère de conjugaison ininterrompu, le système d'électrons π serait étendu sur toute la structure et le gap devrait tendre vers une valeur nulle. Le polymère présenterait ainsi un caractère métallique et un électron présent sur cette chaine pourrait se déplacer librement dans une « super orbitale » π , assimilable à une bande d'énergie. En réalité, la longueur de conjugaison est finie et sature pour une longueur de conjugaison effective (LCE), qui dépasse rarement les 20 unités monomères. Ce phénomène peut être observé en regardant l'évolution du gap ou de la longueur d'onde maximum d'absorption (λ max) lorsque l'on augmente le nombre d'unité monomère (n) d'un oligomère (saturation de λ max ou du gap lorsque n croît) [31]. La raison la plus souvent avancée pour expliquer l'origine de la LCE est la présence de ruptures de conjugaisons liées aux changements de conformation des molécules/monomères ou à des défauts de structure. Cependant, dans le cas de molécules planes (cycles fusionnés), la saturation de λ max subsiste

alors que l'effet de la conformation est négligeable [32]. Une question peut alors se poser : quelle est l'origine fondamentale de ce phénomène ? En réalité, pour un polymère 1D, cela provient du fait que toute excitation est localisée . En effet, une excitation L'état excité est donc localisé et c'est la raison principale pour laquelle si l'on regarde le spectre d'absorption, la longueur d'onde maximum d'absorption (ou le gap) sature lorsque n augmente. Ainsi, les gaps des SCO se situent généralement entre 1,5 et 3 eV [33] et peuvent parfois descendre jusqu'à 1.1 eV [34].



Figure I.6. a) Digramme énergétique de la famille des polyacènes ; b) Surface d'énergie potentiel pour un système conjugué non-dégénéré de polythiophéne ; c) exciton-polaron sur une chaine linéaire de polythiophènes.

I.7. Origine des états localisés dans les SCO :

I.7.1. Pièges électroniques :

Dans cette section, nous allons examiner l'origine des pièges électroniques dans les semiconducteurs organiques et plus particulièrement lorsqu'ils sont utilisés dans une structure transistor. Connaître l'origine des pièges électroniques semble être important dans la mesure où ils vont dicter le fonctionnement du transistor. En effet, les pièges présents dans le semiconducteur et aux interfaces engendrent des instabilités électriques et diminuent les performances du transistor en limitant l'injection et le transport de charge. De plus, il est très difficile d'appréhender le comportement électrique de ces pièges qui peuvent également provoquer une dispersion des paramètres électriques d'un transistor à l'autre. Ainsi, connaissant l'origine des pièges, il sera possible de mettre en place des stratégies pour améliorer les caractéristiques électriques du transistor.

Un piège électronique peut être défini comme un état localisé situé dans le gap du composé organique qui va conduire au piégeage d'une charge électrique. Les pièges électroniques présents dans le semi-conducteur sont d'une grande variété. Nous pouvons, en première approche, les discriminer en fonction de leur caractère intrinsèque ou extrinsèque. Dans la première catégorie, les défauts de structure peuvent provoquer la création de sites de piégeage de charges. Plus généralement, les pièges intrinsèques induisent du désordre, conduisant à la localisation des états étendus. Les impuretés chimiques sont quant à elles considérées comme la source principale de pièges sont considérés comme superficiels si l'agitation thermique est suffisante au dé piégeage du porteur. Dans le cas contraire, on parlera de pièges profonds. Enfin, les pièges peuvent être distingués par rapport à leur localisation, c'est-à-dire s'ils se trouvent à l'interface ou dans le volume.

Les pièges peuvent donc résulter de la présence de défauts structuraux, de désordre énergétique et géométrique ou encore d'impuretés chimiques dans le semi-conducteur. Mis à part le semi-conducteur, les pièges électroniques présents dans le transistor peuvent être dus à l'isolant de grille. En effet le canal se forme dans les premières couches moléculaires à l'interface semi-conducteur/diélectrique. Ainsi les groupements chimiques en surface du diélectrique vont participer au phénomène de piégeage des porteurs de charges. L'effet du diélectrique sera discuté dans la deuxieme chapitre.

I.8. Avantages et inconvénient :

I.8.1. Les avantages :

- Légèreté : pratique pour la portabilité ;
- Flexibilité : moins fragiles que les semi-conducteurs inorganiques, qui doivent être déposés sur des substrats plans et rigides, les semi-conducteurs organiques peuvent par exemple se rouler, comme une feuille de papier (un substrat inorganique se briserait) ;
- Facilité de fabrication et auto-assemblage : les semi-conducteurs organiques sont généralement faciles et économiques à fabriquer en laboratoire. Le génie chimique peut mettre au point des molécules qui s'auto-assemblent. Ces méthodes de fabrication

tranchent avec les processus onéreux et plus difficiles des technologies inorganiques, nécessitant par exemple de très hautes températures et des salles blanches

- I.8.2. Les inconvénients:
 - Durée de vie : le temps de vie des dispositifs d'affichage organique est plus court que celui des LCD traditionnels. Cela est dû au blanchiment (*bleaching* en anglais) des molécules organiques qui émettent la lumière de couleur ;
 - Jetable : l'industrie voit dans les semi-conducteurs organiques, grâce à leur faible coût et à leur facilité de fabrication, la possibilité de faire des dispositifs électroniques jetables. Il y a lieu de se questionner sur l'aspect écologique d'une telle approche

I.9. 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 semiconducteurs organiques est issue des modèles développés pour les semiconducteurs inorganiques. Toutefois, le comportement des semiconducteurs organiques étant très différent de celui des semiconducteurs inorganiques, la compréhension des mécanismes de transport des mécanismes de transport des charges n'est pas complète.

Chapitre II : Les transistors organiques à effet de champ (OFET)

II.1. Introduction :

Les transistors à effet de champ sont des composants incontournables de l'électronique actuelle. Ils sont présents dans toutes les technologies utilisées dans notre quotidien comme les ordinateurs, les téléphones portables, l'électronique automobile pour ne citer qu'elles. Des leaders du semi-conducteur comme STMicroelectronics travaillent à concevoir des transistors toujours plus performants en réduisant, par la même occasion, leur taille (quelques dizaines de nanomètres) pour les intégrer dans tout type de systèmes. Après la découverte de la conduction d'un film de polyacétylène par Alan Heeger, Alan MacDiarmid et Hideki Shirakawa en 1977 [9], un nouveau domaine de l'électronique, dont les recherches sont devenues très actives à partir des années 1990, a vu le jour : l'électronique organique [11]. Elle présente de nombreux intérêts comparée à l'électronique classique comme la production très rapide, à faible coût, de dispositifs sur substrats flexibles et sur de très larges surfaces grâce à des procédés de fabrication par voie liquide semblables à ceux utilisés dans l'imprimerie (« Roll to roll ») [11].

Ce domaine est partagé en trois axes de recherches :

• Les diodes électroluminescentes organiques (OLED) qui sont utilisées dans les écrans de « smartphones » et de téléviseurs pour mener vers des appareils plus flexibles, dont la forme peut être modifiée (écran incurvé). Elles sont commercialisées par des industriels comme Samsung [11] ou encore LG [35]

• Les cellules photovoltaïques organiques (OPV) dont le rendement de conversion énergétique reste faible comparé au silicium. Mais leur flexibilité et la possibilité de les produire sur de très larges surfaces mènent vers de nouvelles applications (stores en OPV, intégration des OPV sur les fenêtres des gratte-ciels, etc.) [11].

• Les transistors organiques à effet de champ (OFET) dont les performances et la stabilité à l'air restent faibles comparés à ceux réalisés en silicium [11]. Les OFETs ne peuvent pas rivaliser avec les FETs silicium car cette technologie est encore trop récente et les performances intrinsèques des semi-conducteurs organiques (SCO) utilisés actuellement, ne peuvent pas dépasser celles du silicium, bien que de grandes avancées aient été faites ces dix dernières années. De ce fait, les applications pour les OFETs sont très différentes des FETs silicium et on peut observer qu'ils ont un grand avenir dans les applications électroniques du futur, comme par exemple les circuits et écrans flexibles (étiquettes RFID (radio frequency identification tags) intégrées dans les vêtements et les emballages, smartphone totalement souple et déformable, journaux électroniques enroulés autour d'un axe) ou encore dans le

domaine médical (greffes de peau électronique « e-skin », capteurs pour encéphalogramme, électrocardiogramme).

II.2. Structure et Principe de fonctionnement des OFETs :

Un transistor à effet de champ organique (OTFT, OFET) est un transistor en couches minces, c'est-à-dire composé de plusieurs couches (Figure II.1) : un film de semi-conducteur organique, deux électrodes ayant pour rôle d'injecter ou d'extraire les porteurs de charges (source et drain), et une électrode de grille isolée du semi-conducteur par un matériau diélectrique permettant de moduler le courant entre le drain et la source. Le transistor fonctionne donc sous l'effet de deux tensions : l'une est appliquée entre la source et la grille (VGS), la seconde entre la source et le drain (VDS) [26, 36, 37]. Le contact de grille permet de modifier la densité de porteurs dans le SCO par l'intermédiaire de l'isolant (« effet de champ »), alors que le champ électrique transverse induit le mouvement des charges. Le transport de charges va alors s'effectuer dans les premières monocouches du semi-conducteur organique à l'interface SCO/isolant.



Figure II.1. a) Structure d'un transistor organique en configuration grille basse/contacts bas composé de trois électrodes (source, drain et grille), d'un diélectrique et d'un semiconducteur ; b) vu de dessus du transistor : les dimensions du canal sont représentées avec W la largeur et L la longueur.

Le transistor organique fonctionne en régime d'accumulation. Il s'agit de la différence majeure avec le transistor inorganique classique. Le canal conducteur est formé par une couche d'accumulation des porteurs majoritaires et non pas par une couche d'inversion des porteurs minoritaires. Lorsqu'aucune polarisation n'est appliquée entre la source et le drain, le transistor peut être considéré comme une capacité MIS [37]. Si l'on applique une tension entre la source et la grille, l'empilement grille/isolant/semi-conducteur se polarise.

La Figure II.2 présente les différents régimes pour une structure métal/isolant/SCO (MIS) idéale (Wm =WS) en fonction de la tension de grille.



Figure II.2. Structure Métal-Isolant-Semi-conducteur (type n) idéale (Wm =WS) sous polarisation avec différents régimes : a) déplétion, b) bandes plates, c) accumulation.

On considère ici un semi-conducteur organique conduisant à un transistor à canal n. Lorsqu'une tension négative est appliquée à la grille, le transistor est en régime de déplétion (Figure II.2, a) et l'interface isolant/semi-conducteur va se dépeupler en électrons. Dans le régime de band plate, la tension de grille annule la courbure de bandes du semi-conducteur. A l'inverse, une tension positive engendre l'accumulation d'électrons à l'interface isolant-semi-conducteur. Le transistor est alors en régime d'accumulation (Figure II.2, c). En d'autres termes, la tension VGS permet de moduler le niveau de fermi du SCO.



Figure II.3. Diagramme idéal de bandes d'un transistor organique. (a) au repos VDS=VGS=0, (b) injection des charges et accumulation, (c) conduction des charges.

Les semi-conducteurs organiques possèdent néanmoins une faible densité de porteurs libres à température ambiante du fait de leurs gaps élevés. En conséquence, pour observer l'accumulation de charges à l'interface isolant/semi-conducteur, il faut que les porteurs de charges puissent être injectés de la source vers le semi-conducteur organique. L'origine de la charge induite par la tension de grille s'explique alors d'après le diagramme simplifié des niveaux d'énergie sur La Figure II.3, a montré les positions des niveaux HOMO/LUMO du SCO par rapport aux niveaux de fermi des électrodes drain/source. Le principe de formation d'un canal de type n est le suivant : Lorsqu'un potentiel positif est appliqué sur la grille, les niveaux de fermi, HOMO et LUMO du semi-conducteur vont se décaler vers les plus basses énergies sous l'effet du champ électrique (Figure II.3, b)[36]. Si le champ électrique de grille est suffisamment grand, l'interaction de la LUMO avec le niveau de fermi de la source permet l'injection d'électrons de la source vers le SCO. La charge injectée par unité de surface est simplement donnée par Qs \simeq – Ci. VGS, où Ci est la capacité de l'isolant. Il y a désormais des électrons mobiles à l'interface SCO/isolant qui, lorsqu'ils sont soumis au champ électrique VDS, donnent lieu à un courant électrique entre la source et le drain (Figure II.3, c). Les charges accumulées à l'interface forment un canal conducteur entre la source et le drain dont la conductivité est proportionnelle au champ VGS [26].

II.3. Généralités sur les transistors organiques à effet de champ :

Les transistors organiques sont des dispositifs à trois bornes de connections, qui, comme leurs semblables au silicium, permettent de contrôler le courant électrique passant entre deux électrodes (la source et le drain), grâce à un contrôle du potentiel à la troisième électrode (la grille). Les transistors organiques à effet de champ fonctionnent de manière similaire aux conventionnels MOSFET (« metal-oxyde semiconductor FET ») ou TFT (« Thin film transistors) par le biais d'un champ électrique établi à travers un isolant (ou diélectrique) séparant la grille du semi-conducteur. Ce champ électrique peut moduler le courant passant à travers le matériau semi-conducteur, créant alors un lien entre la tension de grille *VGS* et le courant de drain *ID*.

II.3.1. Géométries des transistors organique à effet de champ :

Un transistor organique à effet de champ dont un exemple est présenté sur la Figure (II.4. a), est constitué d'une couche de semi-conducteur organique en contact direct avec deux électrodes, la source et le drain ayant pour rôle d'injecter et de collecter les charges, et isolée électroniquement d'une troisième électrode, la grille, par un matériau diélectrique [11]. La grille permet d'agir sur la densité des porteurs de charge dans le semi-conducteur et donc de moduler le courant circulant entre la source et le drain.

Le canal conducteur est défini par la distance entre la source et le drain, dite longueur de canal *L* et par la taille de l'électrode, dite largeur de canal *W*. Ces deux grandeurs, que l'on peut voir en (Figure II.4, b), jouent un rôle important dans le calcul des paramètres caractéristiques des transistors.



Figure II.4. a) Structure d'un transistor organique à effet de champ. Le semiconducteur organique (SCO) est située entre 3 électrodes, la grille dont il est isolé électroniquement par le diélectrique et les électrodes de contact source et drain ; b) Dimensions des électrodes de contact. La longueur de canal L représente la distance entre les deux électrodes, la largeur de canal W équivaut à la taille d'une électrode.

II.3.2. Les différentes géométries possibles :

Les OTFTs présentent plusieurs géométries selon l'ordre dans lequel les différentes couches vont être déposées. On peut alors distinguer les géométries grille basse/grille haute en fonction de la position de la grille et l'isolant par rapport au semi-conducteur. Pour les configurations grille basse (Figure II.5, a et b), le semi-conducteur se situe au-dessus de la grille et l'isolant. A l'inverse, la grille et l'isolant sont déposés sur le semi-conducteur dans le cas d'une configuration grille haute (Figure II.5, c et d). La position relative du semi-conducteur et des électrodes source et drain donnent aussi lieu à deux architectures différentes : on distinguera la configuration contacts hauts où les électrodes drain et sources sont déposés sur le semi-conducteur (Figure II.5, b et d), et la configuration contacts bas où les contacts se situent en dessous du semi-conducteur (Figure II.5, a et c).



Figure II.5. Différentes géométries du transistor organique : a) grille basse/contacts bas ; b) grille basse/contacts hauts ; c) grille haute/contacts bas ; d) grille haute/contacts hauts.

Alors que la géométrie grille haute/contacts hauts est peu fréquente, les trois autres architectures sont toutes employées et ne sont pas équivalentes en termes de performances mais aussi de procédé de fabrication.

Par rapport à une configuration grille basse, la géométrie grille haute offre une encapsulation du SCO. Ainsi, le SCO est protégé de la dégradation structurelle ou des instabilités électriques liées à la présence d'oxygène et d'humidité dans l'air. Cependant, les couches fines de SCO utilisées dans les OTFTs sont fragiles et peuvent être aisément dégradées lors du dépôt de l'isolant. Pour un procédé en solution, il faudra veiller à l'orthogonalité des solvants et éviter ainsi une dissolution du SCO par le solvant du diélectrique [26]. De même, il sera nécessaire d'employer des procédés sous vide basses températures (<100°C) pour prévenir toute modification ou dégradation de la couche semiconductrice. Ainsi, la géométrie grille basse va s'avérer moins contraignante du point de vue technologique mais va présenter l'inconvénient d'exposer le SCO aux contaminants extérieurs dans le cas de dispositifs non encapsulés. La position des contacts source/drain a aussi une influence sur le procédé de réalisation et les performances [26]. La géométrie contacts bas est, du point de vue fabrication, plus facile à mettre en place. Les électrodes drain et source peuvent être définis par photolithographie ou impression sans risque d'endommager le SCO (solvant, gravure liquide). Pour une architecture contacts hauts, les électrodes sour souvent

déposées à travers un masque métallique par évaporation sous vide, ce qui limite la définition, l'alignement et la résolution des motifs ($L > 30\mu m$). Bien que la géométrie contacts bas réduise la complexité de fabrication des transistors, des mobilités plus faibles ont été observées [26]. Ces différences ont été attribuées à des résistances de contact plus élevées pour la configuration contacts bas. Cela peut être expliqué par une perturbation de la croissance cristalline du SCO au niveau des contacts par rapport au canal. Le dépôt du SCO sur un métal induit effectivement une faible injection de charges en raison d'une mauvaise organisation et de régions de faibles mobilités à proximité des électrodes

II.4. Les différents régimes en fonction de VDS et VGS :

II.4.1. OFET à canal de type n :

Les régimes de fonctionnement de l'OFET sont similaires à ceux de son homologue inorganique. Pour un OFET de type n, le drain est polarisé positivement par rapport à la source (VDS > 0). On peut définir, en première approximation la tension seuil VTH comme étant la tension VGS nécessaire pour que le transistor passe du régime de déplétion au régime d'accumulation. On suppose dans ce qui suit que VGS > VTH. Le canal est donc formé et on observe alors une accumulation de charges négatives à l'interface SCO/isolant. La densité de charges va être uniforme uniquement lorsque VDS est nulle [38].

Pour une faible tension VDS tel que VDS << VGS – VTH (Figure II.6, a), la distribution de concentration des électrons entre la source et le drain n'est pas sensiblement modifiée. Le transistor est en régime linéaire et le courant de drain ID varie linéairement avec VDS.

Lorsque VDS augmente, un phénomène de saturation du courant apparaît provoqué par l'évolution de la polarisation de la capacité MIS grille/isolant/semi-conducteur le long du canal. La polarisation de cette capacité provient d'une part de la différence de potentiels entre la source et la grille (VGS) et d'autre part entre le drain et la grille (VGD).

En conséquence, quand la tension drain-source augmente à VGS constant, la capacité MIS est moins polarisée côté drain que côté source (VGD diminue). La concentration de charges, du côté drain, a alors tendance à diminuer et la résistance du canal augmente. Le courant présente ainsi une variation non linéaire avec VDS. Lorsque VDS = VGS – VTH (Figure II.6, b), la capacité MIS n'est plus en accumulation côté drain et il se forme une zone désertée de porteurs libres. On dit que le canal est pincé. Dans la zone de déplétion, les charge sont propulsés jusqu'au drain par le champ électrique intense régnant dans cette région [38].





Lorsque VDS >> VGS – VTH (Figure II.6, c), le point de pincement, dont le potentiel reste constant, se déplace vers la source. La différence de tension aux bornes du canal reste donc constante et le courant de drain ID ne varie plus. Il s'agit du régime de saturation du transistor.

II.4.2. OFET à canal de type p :

Le principe de fonctionnement d'un OFET à canal de type p est le même, seul le signe des tensions VDS et VGS change. L'application de tensions VGS négatives supérieures à VTH en valeur absolue, conduit à une accumulation de charge positive à l'interface SCO /isolant [39].

Les transistors sont généralement caractérisés par deux types de mesures :

- Les caractéristiques de sortie (Figure II.6, b) pour lesquelles le courant de drain ID est mesuré en fonction de VDS pour des tensions de grille VGS constantes. Cette mesure permet de distinguer les régimes de fonctionnement de transistor. Elle peut aussi être utile pour déterminer les résistances de contact.
- Les caractéristiques de transfert (Figure II.6, a) qui correspondent à une mesure du courant de drain ID en fonction de VGS à VDS constant. Cette mesure est souvent effectuée à faible et fort VDS pour pouvoir extraire les paramètres électriques en régime linéaire et saturé.

II.5. Paramètres électriques issus de la caractérisation

Pour évaluer les performances du transistor, plusieurs paramètres clés peuvent être extraits : la mobilité à effet de champ en régime linéaire (μ FElin) et saturé (μ FEsat), la tension de seuil (VTH), la tension de démarrage (VON), la résistance de contact (RC), la pente sous le seuil (SS) et le rapport des courants de drain à l'état passant et à l'état bloquant du transistor (IDON/IDOFF).

II.5.1. Mobilité à effet de champs (µFE) :

La mobilité à effet de champs est un paramètre important dans la caractérisation des transistors organiques puisqu'elle désigne la vitesse de déplacement des charges dans le transistor sous un champ électrique donné. Elle s'exprime en cm2/V.s et définie la fréquence de fonctionnement lorsque le transistor est intégré dans un circuit.

La mobilité à effet de champ peut être évaluée de deux manières différentes selon le régime de fonctionnement. Les équations du transistor utilisées proviennent de la théorie classique MOSFET qui suppose une mobilité constante et indépendante du champs électrique VDS et VGS.

• En régime linéaire (VDS ≤ VGS-VTH), le courant de drain est donné par la relation suivante :

$$I_{D=\frac{WC_i}{L}\mu_{FELIN}(V_{GS}-V_{TH})V_{DS}}$$
(II.1)

Ou W et L sont respectivement la largeur et la longueur du canal, ID est le courant de drain, Ci la capacité surfacique de l'isolant, μFElin la mobilité à effet de champ linéaire, VDS la tension drain-source, VGS la tension grille-source et VTH la tension de seuil.

La mobilité s'exprime alors par :

$$\mu_{FELIN} = \frac{L}{WC_I V_{DS}} \frac{\partial I_D}{\partial V_{GS}} = \frac{L}{WC_I V_{DS}} g_m \quad (II.2)$$

Pour déterminer la mobilité, il suffit simplement de tracer le graphe ID =f(VGS) puis de calculer la dérivée de cette fonction (gm : transconductance).

- En régime saturé (VDS \geq VGS-VTH), le courant de drain est donné par :

$$I_D = \frac{WC_i}{2L} \mu_{FEsat} (V_{GS} - V_{TH})^2$$
(II.3)

La mobilité à effet de champ en régime saturé s'exprime donc par :

$$\mu_{FEsat} = \frac{2L}{W \times C} \times \left(\frac{\partial \sqrt{I_D}}{\partial \sqrt{V_{GS}}}\right)^2 \tag{II.4}$$

Par conséquent, pour calculer cette mobilité, il suffit de tracer \sqrt{ID} en fonction de VGS. A partir de ce graphe, on calcule la dérivée puis on en déduit la mobilité μ FEsat en régime de saturation.

Expérimentalement, les mobilités à effet de champ en régime linéaire sont inférieures à celles obtenues en régime saturé[26]. Cela peut être expliqué par la présence de résistances de contacts (RC) élevées. A faible VDS (régime linéaire), la chute de potentiel induite par RC est significative par rapport VDS. En revanche, pour de fort VDS (régime saturé), la chute de tension devient négligeable. La mobilité linéaire, étant calculée à plus faible VDS, sera donc sous-estimée et inférieure à la mobilité saturée. Une deuxième possibilité pour expliquer cette différence est la dépendance de la mobilité en fonction de VDS pour les matériaux désordonnés. La mobilité saturée est mesurée à fort VDS et peut donc bénéficier de l'émission de porteurs piégés par le champ électrique. Enfin, on observe aussi une augmentation de la mobilité avec VGS.

II.5.2. Tension de seuil (VTH) et de démarrage (Von) :

La tension de seuil VTH est la tension de grille VGS à partir de laquelle le canal devient conducteur. Comme pour la mobilité à effet de champ, la définition de la tension de seuil vient des équations classiques des transistors de type MOSFET. Elle correspond en fait à la valeur VGS pour laquelle le canal passe du régime de faible inversion au régime de forte

a) b) (V_{TR}, I_{DSAT}) I_{on} 40,0µ = 15V I_D(A) - Semi Log I_D(A) - Linéaire (A) 20,0µ ′_{GS}= 10∨ 1/SSloff = 5V V_{aa}= 0V 0.0 Von V_{TH} 10 20 30 40 $V_{GS}(V)$ 0 V_{DS}(V)

inversion. Les OFET fonctionnent en régime d'accumulation avec des contacts de natures différentes (pas de jonction PN), ainsi on peut s'interroger sur la validité de cette valeur

Figure II.7. a) extraction des paramètres électriques en régime linéaire à partir de la courbe de transfert en échelle semi-logarithmique et linéaire ; b) caractéristique de sortie d'un transistor de type n – la tension de transition(VTR) et le courant de drain saturé(IDSAT) sont extrait à VGS donnée pour évaluer la résistance de contact RC.

Pour les OFET le seuil correspond au passage du régime de déplétion au régime d'accumulation. La tension de seuil devrait tout simplement être le potentiel de bandes plates VFB. Pour une structure MIS non-idéal, le potentiel nécessaire à l'établissement du régime de bandes plates vient d'une part de la différence des travaux de sortie de la grille (WGrille) et du SCO (WSCO) et d'autre part, de la présence de charges à l'interface isolant/SCO (Qi), on a alors :

$$V_{FB} = \frac{W_{Grille} - W_{sco}}{e} - \frac{Q_i}{Q_i}$$
(II.5)

En réalité, le potentiel de bande plate correspond à la tension de démarrage Von observée sur la courbe de transfert sous forme semi-logarithmique (Figure II.7, a). Ainsi, Von représente la tension à partir de laquelle les charges commencent à s'accumuler dans le canal. Dans la majorité des cas, VTH et VON n'ont pas les mêmes valeurs. Cette différence est en grande partie due à la présence de pièges électroniques dans le SCO et à l'interface SCO/isolant, qui ont tendance à freiner la formation du canal. En effet, une densité suffisante de porteurs doit être accumulée pour que les pièges localisés dans la bande interdite se remplissent, que la mobilité augmente et que le transistor soit passant. Une autre origine pour expliquer la différence entre VTH et VON, est la présence de charge libre intrinsèque dans le SCO. Ainsi pour un semi-conducteur de type n, la tension de seuil VTH possède deux contributions et s'écrit de la manière suivante :

$$V_{th} = V_{FB} - \frac{qn_0d_s}{c_i} \tag{II.6}$$

Avec no la densité de charges intrinsèques volumique du SCO, ds l'épaisseur du semiconducteur, q la charge élémentaire et Ci la capacité de l'isolant. Expérimentalement, la tension de seuil peut être extraite en régime saturé et linéaire. Sur le graphe ID=f(VGS), en régime linéaire (Figure II.7, a), on déterminera la tension de seuil grâce l'intersection entre l'axe des abscisses et la régression linéaire de la courbe. Pour le régime saturé, on reprend le même principe mais sur le graphe \sqrt{ID} en fonction de VGS. Dans le cas d'un transistor MOS conventionnel, le régime sous le seuil est extrêmement abrupt et la tension de seuil est clairement définie. Pour les OFETs, l'augmentation du courant sous le seuil est plus graduelle, ceci en raison d'un grand nombre d'états dans le gap. La définition de la tension de seuil n'est donc pas aussi rigoureuse. Nous précisons néanmoins que nous travaillerons avec la tension de seuil en régime linéaire qui nous permettra de comparer les divers transistors réalisés.

II.5.3. Pente sous le seuil (SS) :

La pente sous le seuil (SS) nous renseigne sur la vitesse de basculement du transistor de l'état bloqué à l'état passant. Elle s'exprime en volts/décade et correspond à la variation du potentiel de grille nécessaire pour augmenter le courant de drain d'une décade. Elle peut être déterminée en prenant l'inverse de la pente sur la courbe log(ID)=f(VGS) (Figure II.7, a). En supposant que la densité de pièges est indépendante de l'énergie, la pente sous le seuil s'exprime de la manière suivante :

$$SS = \frac{KTln(10)}{e} \left(1 + \frac{e^2}{C_i} N_{trap}\right)$$
 (II.7)

Avec k la constante de Boltzmann, T la température, e la charge élémentaire, Ci la capacité surfacique de l'isolant (Ci = $\epsilon 0\epsilon r/e$) et Ntrap la densité de pièges dans le volume du SCO et à l'interface SCO/isolant. Ainsi, la pente sous le seuil est simplement une mesure de la quantité de défauts. Une densité de pièges élevée freine la formation du canal et conduit à une valeur de SS importante. Une forte capacité surfacique et une faible quantité de défaut sont donc recommandées pour obtenir un transistor opérant à basse tensions.

II.6. Analyse du besoin pour le transistor organique :

Le transistor doit montrer un niveau de performance minimum en fonction de l'application visée. Dans les circuits, le transistor peut avoir deux fonctions majeures : il peut être utilisé en tant que sources de courant ou en tant que commutateur. Dans le premier cas, le transistor fonctionne en mode statique (tension de polarisation constante) et les exigences sont les suivantes :

• Le courant ID délivré par le transistor doit être important.

• Le courant délivré par le transistor ne doit pas varier dans le temps lorsqu'il est soumis à une polarisation continue.

Le régime linéaire de fonctionnement doit être stable. Ainsi, une forte mobilité à effet de champ et une bonne stabilité électrique sont requises. Dans le cas d'un commutateur, les exigences sont différentes dans la mesure où le transistor opère de manière dynamique avec une sollicitation en fréquence :

• Le temps de réponse du transistor alimenté en tension doit être faible.

• La différence de résistance du transistor entre l'état « off » et « on » doit être la plus grande possible (RDS extrait sur les caractéristiques de sortie).

- De haute fréquence pour couvrir un champ d'application le plus large possible.
- Le transistor doit montrer une stabilité électrique en fréquence.

En conséquence, par rapport à l'application commutateur, le transistor devra montrer en plus une bonne pente sous le seuil (temps de réponse). En outre, de nombreux dispositifs comportant des circuits organiques sont destinés à des applications portatives. On comprend bien que les tensions de fonctionnement des circuits imprimés, généralement situées entre [32] et 60 V [40], sont incompatibles avec l'aspect portatif. Il est donc nécessaire d'obtenir des faibles tensions de travail qui vont en outre réduire la consommation énergétique des circuits.

Une autre façon de minimiser la consommation consiste à utiliser la technologie CMOS (Complementary Metal-Oxide-Semiconductor) pour la réalisation de circuits électroniques. La majorité des circuits intégrés modernes sont effectivement basés sur cette technologie qui est la combinaison d'un transistor de type n et type p de caractéristiques électriques équivalentes. Le transistor de type n, jusqu'alors moins étudié, possède des performances et stabilités électriques inférieures à son homologue de type p. Par conséquent, il est nécessaire d'améliorer et de développer les transistors de type n. Cela passera inévitablement par une

compréhension des mécanismes de conduction et de stabilité électrique qui vont être dépendant de la structure du transistor et de la nature des matériaux qui le composent.

Pour résumer, les besoins spécifiques peuvent être définis de la manière suivante :

• Une étude approfondie du transistor organique pour une meilleure compréhension de l'impact des matériaux et interfaces sur les performances et de la stabilité électrique.

• Le développement des transistors de type n performants et stables indispensables pour la réalisation de circuits complémentaires à basse consommation.

II.7. Conclusion :

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 inorganiques et le modèle de caractérisation des MOSFET utilisé pour décrire le fonctionnement des OFET 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.

Chapitre III : Simulation du transistor organique par TCAD

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 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.

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.



Entrées

Sorties

Figure III.1. Entrées/sorties du simulateur Atlas.

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 et caractérisation du transistors OFET :

III.3.1. Description de la structure simulée

Comme nous pouvons le voir ci-dessous, nous avons utilisé un transistor organique à couche mince à grille supérieure avec une largeur de 0,5 um et une longueur de 20 um. La grille est Au et l'épaisseur est de 0,05 um avec une longueur de 20 um où seulement 10 um sont utilisés pour le canal. Pour le drain et la source, nous utilisons Cu avec une épaisseur de 0,15 um et une longueur de 4,5 um. L'isolant supérieur est en oxyde de silicium avec une épaisseur tox = 0,1um. Le canal est du pentacène avec une épaisseur de 0,05 um. De plus, le substrat est en oxyde de silicium avec une épaisseur de 0,1 um. En général, la longueur du canal varie de 10 à 50 um et la largeur du canal de 0,002 à 0,1 um.



Figure III.2. Structure générale du transistor.

Voici le résultat structurel après la simulation. Nous pouvons voir que nous avons une augmentation de l'étalement du potentiel en raison de l'augmentation de la tension de grille.



Figure III.3. Configuration du potentielle dans la fonction initiale.



Figure III.4. Configuration du potentiel en fonction de haute tension.

De plus, le champ électrique est présenté ci-dessous. Nous pouvons voir que nous avons une augmentation du champ électrique en raison de l'augmentation de la tension de grille.



Figure III.5. Configuration de champ électrique en fonction initiale.



Figure III.6. Configuration du champ électrique en fonction haute tension.

III.3.2. Caractéristique de sortie IDS (VDS) et caractéristiques de transfert IDS (VGS):

Nous avons représenté sur les figures III.7 et III.8 les caractéristiques de transfert simulées qui consiste à tracer l'évolution du courant drain-source IDS, en fonction de tension grillesource VGS pour une tension drain-source VDS, donnée (-1, -5 et -10 V). On observe une augmentation du courant de drain à mesure que la tension de grille augmente. Nous avons aussi représenté sur la figure III.9 les caractéristiques de sortie donnant l'évolution du courant IDS circulant entre le drain et la source lorsque l'on fait croître la tension VDS en maintenant la tension VGS à des valeurs constantes., le courant de drain augmente avec l'augmentation de la tension de drain.



Figure III.7. Caractéristique de transfert IDS-VGS à l'échelle linéaire-linéaire.



Figure III.8. Caractéristique de transfert IDS-VGS à l'échelle logarithmique-linéaire.



Figure III.9. Caractéristiques de sortie IDS-VDS du OFET.

III.4. Etude de l'influence des paramètres technologiques :

Les paramètres technologiques jouent un rôle important dans l'optimisation et l'amélioration des performances électriques d'une telle structure. Dans cette optique, nous nous intéressons à étudier l'influence de quelque paramètres technologiques telles que la longueur de canal, largeur de canal, sur les caractéristiques de OFET.

III.4.1.Effet de la Longueur et la largeur de la grille sur les caractéristiques de transfert :



Figure III.10. Influence de la longueur de grille « L » sur les caractéristiques I-V. On peut dire qu'il y a une diminution du courant à mesure que la longueur du canal augmente où le Vds est toujours -10.



Figure III.11. Influence de la largeur de grille « W » sur les caractéristiques I-V.

La comparaison du canal de largeur dans les courbes de sortie est tout aussi importante. Comme on peut le voir, il y a une augmentation du courant lorsque la longueur du canal augmente où le Vds est toujours -10.

III.4.2.Effet de la Longueur et la largeur de la grille sur la tension du seuil :



Figure III.12. Tension de seuil pour différentes longueurs de canal.



Figure III.13. Tension de seuil pour différentes largeurs de canal.

La tension de seuil généralement abrégée en Vth est la tension de grille à source minimale VGS (th) qui est nécessaire pour créer un chemin conducteur entre les bornes de source et de drain. C'est un facteur d'échelle important pour maintenir l'efficacité énergétique.

Comme indiqué ci-dessous, la comparaison de la tension de seuil pour les différentes longueurs et largeurs de canal. La tension de seuil pour différentes longueurs reste la même.

Nous avons observé aussi une diminution de la tension de seuil à mesure que la largeur du canal augmente.

III.4.3.Effet de la Longueur et la largeur de la grille sur la pente sous le seuil (SS) :

La pente sous seuil est une caractéristique courant-tension très importante dans tous les transistors. Dans la région sous-seuil, le comportement du courant de drain - bien qu'il soit contrôlé par la borne de grille - est similaire au courant décroissant exponentiellement d'une diode polarisée en direct. Par conséquent, un tracé du courant de drain en fonction de la tension de grille avec des tensions de drain, de source et de masse fixes présentera un comportement linéaire approximativement log dans le régime de fonctionnement du MOSFET. Sa pente est le pente sous-seuil.



Figure III.14. Pente du sous-seuil pour différentes longueurs.



Figure III.15. Pente sous-seuil pour différentes largeurs.

Pour les SS de différentes longueurs, nous pouvons voir une diminution à mesure que la longueur du canal augmente, ce qui signifie qu'il y a une optimisation.

Pour les SS de différentes largeurs, nous pouvons voir que les SS reste.

III.4.4.Effet de la Longueur et la largeur de la grille sur ION :

Dans cette section à partir des graphiques d'entrée avec le plus élevé (Vds = -10), nous avons trouvé l'ion (Vgs = -10) pour chaque longueur différente. De même, pour les différentes largeurs. Les résultats sont présentés ci-dessous. Pour l'ion de plus grandes longueurs, nous pouvons voir que l'I_{ON} diminue, ce qui signifie une détérioration. Pour l'I_{ON} dans différentes largeurs, nous pouvons voir une augmentation à mesure que la largeur du canal augmente et cela signifie qu'il y a une optimisation.



Figure III.16. I_{ON} pour différentes longueurs de canal.



Figure III.17. I_{ON} pour différentes largeurs de canal.

III.4.5.Effet de la Longueur et la largeur de la grille sur GMAX :

Ce paramètre est la transconductance maximale. Cela signifie que dans le graphe de la fonction de transfert, nous pouvons trouver la pente maximale:

$$g_m = \frac{\Delta I_D}{\Delta V_{dG}} \tag{III.1}$$

Où gm est la transconductance (pour la conductance de transfert). La transconductance est la caractéristique électrique reliant le courant traversant la sortie d'un appareil à la tension aux bornes de l'entrée d'un appareil. La transconductance ou conductance est l'inverse de la résistance.

Ici, nous examinons la dépendance de Gmax pour différentes longueurs et largeurs. Pour le Gmax de différentes longueurs, nous pouvons voir une diminution à mesure que la longueur du canal augmente, ce qui signifie qu'il y a une détérioration. Pour le Gmax dans différentes largeurs, nous pouvons voir que Gmax augmente, ce qui signifie une optimisation.



Figure III.18. Gmax pour différentes longueurs de canal.



Figure III.19. Gmax pour différentes largeurs de canal.

III.5. Conclusion :

Ce chapitre est consacré à la simulation 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 simulation 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 simulation rend aussi compte de l'effet de la longueur du canal sur les caractéristiques des transistors organiques, ainsi que de l'influence de la largeur du canal.

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.

Conclusion général

Conclusion Générale :

L'objectif de notre travail était d'étudier les paramètres technologiques et électriques d'un transistor OFET à l'aide du simulateur TCAD-SILVACO.

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, les transistors organiques.

La simulation a été effectuée au moyen du simulateur TCAD-SILVACO, qui permet la modélisation du comportement technologique et électrique des composants à base de semiconducteurs. Nous avons ensuite mis au point, à travers un ensemble de modèles physiques sur lesquels est basé le logiciel, la simulation des différentes paramètres technologique et géométriques (L longueur, W largeur du canal), à l'aide de l'outil Atlas de TCAD-SILVACO. L'ensemble des simulations par Atlas nous a permis d'obtenir un cahier des charges qui regroupe tous les paramètres technologiques et géométriques du dispositif à étudier.

• 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.

Université de Mohamed El-Bachir El-Ibrahimi - Bordj Bou Arreridj Faculté des Sciences et de la technologie Département d'Electronique

Références bibliographiques

Université de Mohamed El-Bachir El-Ibrahimi - Bordj Bou Arreridj Faculté des Sciences et de la technologie Département d'Electronique

Références bibliographiques:

- 1. Schwarze, M., et al., *Molecular parameters responsible for thermally activated transport in doped organic semiconductors.* 2019. **18**(3): p. 242-248.
- 2. Zuo, G., et al., *General rule for the energy of water-induced traps in organic semiconductors.* 2019. **18**(6): p. 588-593.
- 3. Yurash, B., et al., *Towards understanding the doping mechanism of organic semiconductors by Lewis acids.* 2019. **18**(12): p. 1327-1334.
- 4. Kim, H., et al., Organic solar cells based on conjugated polymers: History and recent advances. 2014. **31**(7): p. 1095-1104.
- 5. Spanggaard, H., F.C.J.S.E.M. Krebs, and S. Cells, *A brief history of the development of organic and polymeric photovoltaics.* 2004. **83**(2-3): p. 125-146.
- 6. Lidzey, D., et al., *Room temperature polariton emission from strongly coupled organic semiconductor microcavities.* 1999. **82**(16): p. 3316.
- 7. Karki, A., et al., Unifying energetic disorder from charge transport and band bending in organic semiconductors. 2019. **29**(20): p. 1901109.
- 8. Moulahcene, F., et al., *Design of CMOS two-stage operational amplifier for ECG monitoring system using 90nm technology.* International Journal of Bio-Science and Bio-Technology, 2014. **6**(5): p. 55-66.
- 9. Chiang, C., et al., *Synthesis of highly conducting films of derivatives of polyacetylene*,(*CH*) *x*. Journal of the American Chemical Society, 1978. **100**(3): p. 1013-1015.
- 10. Klauk, H.J.C.S.R., *Organic thin-film transistors*. 2010. **39**(7): p. 2643-2666.
- 11. Toulouse, M.A.L.P.C., *Transistors organiques transparents et imprimes a base de pentacène*, 2009, Université de Limoges.
- 12. Puigdollers, J., et al., *Pentacene thin-films obtained by thermal evaporation in high vacuum.* Thin solid films, 2003. **427**(1-2): p. 367-370.
- 13. Tao, C.-L., et al., *Solution processed pentacene thin films and their structural properties.* Materials Science and Engineering: B, 2007. **140**(1-2): p. 1-4.
- 14. Wu, H., et al., *Topographic substrates as strain relief features in stretchable organic thin film transistors*. Organic Electronics, 2013. **14**(6): p. 1636-1642.
- 15. Bao, Z., A. Dodabalapur, and A.J. Lovinger, *Soluble and processable regioregular poly* (*3-hexylthiophene*) for thin film field-effect transistor applications with high mobility. Applied physics letters, 1996. **69**(26): p. 4108-4110.
- 16. Sirringhaus, H., et al., *High-resolution inkjet printing of all-polymer transistor circuits*. Science, 2000. **290**(5499): p. 2123-2126.
- 17. Bao, Z., et al., *High-performance plastic transistors fabricated by printing techniques.* Chemistry of Materials, 1997. **9**(6): p. 1299-1301.
- Hofmockel, R., et al., High-mobility organic thin-film transistors based on a small-molecule semiconductor deposited in vacuum and by solution shearing. Organic Electronics, 2013.
 14(12): p. 3213-3221.
- 19. Gao, X. and Z. Zhao, *High mobility organic semiconductors for field-effect transistors*. Science China Chemistry, 2015. **58**(6): p. 947-968.
- 20. Yuen, J.D. and F. Wudl, *Strong acceptors in donor–acceptor polymers for high performance thin film transistors.* Energy & Environmental Science, 2013. **6**(2): p. 392-406.
- 21. Yamashita, Y., et al., *Transition between band and hopping transport in polymer field-effect transistors*. Advanced materials, 2014. **26**(48): p. 8169-8173.

Université de Mohamed El-Bachir El-Ibrahimi - Bordj Bou Arreridj Faculté des Sciences et de la technologie Département d'Electronique

- 22. Li, Y., et al., *High mobility diketopyrrolopyrrole (DPP)-based organic semiconductor materials for organic thin film transistors and photovoltaics.* Energy & Environmental Science, 2013. **6**(6): p. 1684-1710.
- 23. Kang, I., et al., *Record high hole mobility in polymer semiconductors via side-chain engineering.* Journal of the American Chemical Society, 2013. **135**(40): p. 14896-14899.
- 24. Nguyen, D.-T., Utilisation d'un oxyde comme couche tampon à l'interface électrode/semiconducteur organique dans une cellule photovoltaïque, 2013, Nantes.
- 25. Monsieur, T.-V.F., Semi-conducteurs organiques π -conjugués pour l'élaboration de dispositifs photovoltaïques hybrides solides à colorant, Université François Rabelais-Tours.
- 26. Robin, M., Développement de transistors à effet de champ organiques et de matériaux luminescents à base de nanoclusters par impression à jet d'encre, 2017.
- 27. Picon, J.-D., *De l'effet de la polarisation électronique sur le transport de charge dans les semiconducteurs moléculaires*, 2006, EPFL.
- 28. Irfan, et al., *Energy level evolution of molybdenum trioxide interlayer between indium tin oxide and organic semiconductor.* 2010. **96**(7): p. 31.
- 29. Ruden, P.P. and D.L.J.J.o.a.p. Smith, *Theory of spin injection into conjugated organic semiconductors*. 2004. **95**(9): p. 4898-4904.
- 30. Koch, N.J.p.s.s.R.R.L., *Electronic structure of interfaces with conjugated organic materials*. 2012. **6**(7): p. 277-293.
- 31. Zhang, L., et al., *Oligothiophene semiconductors: synthesis, characterization, and applications for organic devices.* ACS applied materials & interfaces, 2014. **6**(8): p. 5327-5343.
- 32. Aragó, J., et al., Neutral and Oxidized Triisopropylsilyl End-Capped Oligothienoacenes: A Combined Electrochemical, Spectroscopic, and Theoretical Study. Chemistry–A European Journal, 2010. **16**(18): p. 5481-5491.
- 33. Brütting, W., Introduction to the physics of organic semiconductors. Physics of organic semiconductors, 2005: p. 1-14.
- 34. Hu, X., et al., Solution-processed high-detectivity near-infrared polymer photodetectors fabricated by a novel low-bandgap semiconducting polymer. The Journal of Physical Chemistry C, 2013. **117**(13): p. 6537-6543.
- 35. Houin, G., Développement d'amplificateurs sur substrats flexibles à partir de transistors organiques à effet de champ, 2017.
- 36. Facchetti, A.J.M.T., *Semiconductors for organic transistors*. 2007. **10**(3): p. 28-37.
- 37. Gamota, D.R., et al., *Printed organic and molecular electronics*2013: Springer Science & Business Media.
- 38. Usta, H., A. Facchetti, and T.J.J.A.o.c.r. Marks, *n-Channel semiconductor materials design for organic complementary circuits.* 2011. **44**(7): p. 501-510.
- 39. Lan, S., et al., *Improving device performance of n-type organic field-effect transistors via doping with a p-type organic semiconductor*. 2019. **7**(15): p. 4543-4550.
- 40. Chang, J., et al., *Fully printed electronics on flexible substrates: High gain amplifiers and DAC.* Organic Electronics, 2014. **15**(3): p. 701-710.