

### TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

### SIMULAÇÃO DO IMPACTO DAS ARMADILHAS NAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS DE UM TRANSISTOR DE FILMES FINOS ORGÂNICOS

Pedro Paulo Bispo de Oliveira

Brasília, julho de 2015

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA Faculdade de Tecnologia

### TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

### SIMULAÇÃO DO IMPACTO DAS ARMADILHAS NAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS DE UM TRANSISTOR DE FILMES FINOS ORGÂNICOS

Pedro Paulo Bispo de Oliveira

Relatório submetido ao Departamento de Engenharia Elétrica como requisito parcial para obtenção do grau de Engenheiro de Computação

Banca Examinadora

Prof. Dr. Stefan Michael Blawid, ENE/Un<br/>BOrientador

Prof. Dr. Alexandre Ricardo Soares Romariz, ENE/UnB Examinador externo

Prof. Dra. Artemis Marti Ceschin, ENE/UnB *Examinador interno* 

### Dedicatória

A Deus, em primeiro lugar, aos meus pais, minha irmã, minha família e meus amigos, pelo incessante apoio durante essa jornada.

Pedro Paulo Bispo de Oliveira

#### Agradecimentos

Gostaria de agradecer primeiramente a Deus, pela força e pela coragem que fizeram com que eu nunca desistisse de continuar.

Ao professor Stefan, pela orientação exemplar, pelo grande empenho em ensinar, pela paciência em sanar qualquer tipo de dúvida, pelo ótimo convívio e, sobretudo, pela amizade que se estende fora dos limites da universidade.

Aos meus amados pais, José Antonio e Maria Bispo, pelo constante incentivo, por aguentarem minhas angústias e por não medirem esforços em me ajudar. Vocês são meus maiores exemplos, sem o apoio de vocês certamente eu não chegaria nessa etapa da vida.

À minha irmã Anne Karoline, a quem tenho plena confiança, pela ajuda, pelo companheirismo e por sempre estar por perto quando precisei. Incluo aqui meus agradecimentos ao meu cunhado Rodolfo, por todas as dicas passadas e por fazer minha irmã feliz.

À minha família, incluindo primos, tios e minha avó Izaura, que me acompanharam e colaboraram nos momentos de dificuldade. Aqui destaco meus primos Layse e Matheus, que são como irmãos para mim.

Aos meus amigos Danielly, Wagner, Walner e Walter, por abrandar os árduos momentos impostos por esse trabalho e por permitirem que nossa amizade de infância se prolongue até hoje, cada dia mais forte.

Aos meus amigos "descolados", pela verdadeira amizade firmada desde o primeiro semestre do curso e que continua muito forte. Sentirei falta dos momentos que compartilhamos na universidade, desde os trabalhos em grupo que vocês me ajudaram até as horas de descontração que tivemos.

As minhas amigas Ana Paula e Rebeca, que além de me motivarem, sempre estiveram presentes proporcionando muitos momentos de conversas e risadas. Superamos juntos as dificuldades desse curso e tenho certeza que seremos amigos para a vida toda. Enfim, a todos que ajudaram na minha formação, o meu mais sincero obrigado.

Pedro Paulo Bispo de Oliveira

#### RESUMO

A substituição de materiais semicondutores inorgânicos por alternativas orgânicas é uma tecnologia microeletrônica promissora, proporcionando flexibilidade e sustentabilidade a preços baixos. Com o intuito de desenvolver mais essa tecnologia emergente, há um maior interesse em otimizar os dispositivos correspondentes para revelar o verdadeiro potencial que os materiais orgânicos têm a oferecer. Este projeto procura explicar como a distribuição de armadilhas (espacialmente e energeticamente) em um semicondutor orgânico pode afetar as concentrações de elétrons e lacunas móveis, as características elétricas de transistores de filmes finos e as medidas de mobilidade. Nesse âmbito, um simulador da Equação de Poisson unidimensional foi implementado usando a plataforma MATLAB. O simulador é capaz de simular densidade de cargas, potencial de superfície e potencial eletrostático ao longo da seção transversal do semicondutor. Baseadas em procedimentos simples de regressão para a dependência da concentração de cargas livres (não-capturadas) pelo potencial eletrostático, foram desenvolvidas equações analíticas para as características elétricas de transistores de filmes finos com grandes densidades de armadilhas. Conforme o modelo semianalítico desenvolvido, vários tópicos foram investigados: o impacto da densidade de armadilhas nas características de transferência e saída do transistor; o impacto de uma distribuição exponencial das energias de armadilhas dentro da banda proibida; as consequências para procedimentos de extração de valores de mobilidade baseados nas características do transistor e a modelagem de um transistor de filmes finos de tipo-p e tipo-n, empregando o P3HT como um semicondutor orgânico com um valor real para a densidade de armadilhas.

### ABSTRACT

The replacement of inorganic semiconducting materials by organic alternatives is a promising microelectronic technology, providing flexibility and sustainability at lower prices. In order to develop this forthcoming technology further, there is a greater interest to optimize corresponding devices to reveal the true potential that organic materials can offer. The given project looks to explain how the trap distribution (spatially and energetically) in an organic semiconductor can affect mobile electron and hole concentrations, the electric characteristics of thin-film transistors and mobility measurements. To this extent, an one-dimensional Poisson's Equation solver was implemented using a MATLAB platform. The solver is capable of simulating charge density, surface potential and electrostatic potential along the semiconductor cross-section. Based on simple fitting procedures for the electrostatic potential dependance of the free (not-trapped) charge concentration, analytic equations for the electric characteristics of thin-film transistors with high trap densities were developed. According to the developed semi-analytic model, several topics were investigated: the impact of trap density on the transfer and output characteristics of the transistor; the impact of an exponential distribution of trap energies within the band gap; the consequences for extraction procedures of mobility values based on transistor characteristics and the modelling of a p- and n-type thin-film transistor, employing P3HT as organic semiconductor with a realistic value for the trap density.

# SUMÁRIO

1	Introd	ução	1
<b>2</b>	Revisão Bibliográfica		
	2.1	Transistores de Filmes Finos Orgânicos	4
	2.2	Equação de Poisson	9
	2.3	Diodos de portadores únicos	10
	2.3.1	Corrente Limitada pela Carga Espacial	10
	2.3.2	Corrente Limitada pelas Armadilhas	11
3	Desenv	volvimento	13
	3.1	Introdução	13
	3.2	Implementação da Equação de Poisson	14
	3.2.1	Discretização da Equação de Poisson	14
	3.2.2	Comparação dos cálculos analíticos e numéricos para uma densi-	
		DADE LINEAR DE PORTADORES	16
	3.3	Descrição dos Algoritmos usando MATLAB	19
	3.3.1	Pré-calculos do algoritmo	20
	3.3.2	Primeira iteração e loop interno	22
	3.3.3	Segundo e terceiro loops	24
	3.3.4	Passo final	28
<b>4</b>	Result	ados da Simulação e Discussões	31
	4.1	Introdução	31
	4.2	Perfis de densidade e concentração de portadores a partir da	
		TENSÃO NA PORTA	31
	4.2.1	Densidade de elétrons e lacunas	31
	4.2.2	Densidade de portadores livres	34
	4.2.3	Potencial de superfície	39
	4.3	Extração da mobilidade	40
	4.4	Características de transferência e saída	43
	4.4.1	Semicondutor do TIPO-P	43
	4.4.2	Semicondutor do TIPO-N	45
	4.5	Impacto das armadilhas	47

	4.5.1	Variação de densidade das armadilhas	47
	4.5.2	Variação de distribuição exponencial na banda proibida das arma-	
		DILHAS	53
	4.6	Simulação com P3HT	57
	4.7	Discussões sobre Mobilidade	59
	4.8	Equação Característica do Transistor com Impacto das Armadilhas	60
<b>5</b>	Conclus	sões	63
	5.1	Trabalhos Futuros	64
RF	EFERÊN	ICIAS BIBLIOGRÁFICAS	65
An	exos		67
Ι	Resulta	dos adicionais	68
II	Funçõe	s MATLAB adicionais	70
III	Descriç	ão do conteúdo do CD	79

## LISTA DE FIGURAS

1.1	Imagem ilustrativa do transistor de efeito de campo do tipo $p$ . Adaptada de $[1]$	2
2.1	Imagem ilustrativa de transistor tipo-n em modo enriquecimento quando aplica-se uma tensão $V_{ds}$ . Adaptada de [2]	5
2.2	Curva de transferência de um transistor tipo-n em modo acumulação, para regiões	
	de triodo e saturação. Adaptada de [2]	6
3.1	Imagem ilustrativa do transistor de filmes finos considerado no estudo	13
3.2	Soluções analítica e numérica usando 50 pontos e tensão de superfície igual a $-2~\mathrm{V}.$	18
3.3	Fluxograma para algoritmo com apenas um loop	27
3.4	Fluxograma para algoritmo com três loops	28
4.1	Gráfico da quantidade de lacunas para diferentes tensões negativas na porta em	วา
4.9	Cada posição do semicondutor	32
4.2	Granco da quantidade de electrons para diferentes tensoes negativas na porta em	าก
4.9	Cada posição do semicondutor	32
4.3	Granco da quantidade de lacunas para diferentes tensoes positivas na porta em	-0-0
11	Cada posição do semicondutor	33
т.т	cada posição do semicondutor	33
45	Gráfico da densidade de cargas para diferentes tensões negativas na porta	35
4.6	Gráfico da densidade de cargas para diferentes tensões nositivas na porta	35
4.7	Esquemático da primeira estratégia para definir o comportamento da densidade de	00
1.1	portadores livres	36
48	Gráficos das regressões lineares efetuadas para tensões negativas e positivas de -12	00
1.0	a 12 V	37
19	Cráficos das regressões lineares efetuadas para tensões negativas e positivas de -40	51
т.5	o 40 V	37
4 10	Esquemético de segunde estretégie pero definir o comportemente de densidade de	57
4.10	Esquematico da segunda estrategia para demini o comportamento da densidade de	20
1 1 1	Chéfeag des normagins não lingenes efetuadas nore tenções normativas e recitivas des	90
4.11	Grancos das regressões nao-inteares eletuadas para tensões negativas e positivas, de	20
4.10	-40 a 40 v	39
4.12	Grafico do potencial na interface para diferentes tensoes positivas na porta	40

4.1	3 Gráfico da característica de transferência do P3HT com amostras usando a raiz	
	quadrada da corrente e regressão linear para baixo peso molecular	41
4.1	4 Gráfico da característica de transferência do P3HT com amostras usando regressão	
	não-linear para baixo peso molecular	42
4.1	5 Gráfico da característica de transferência do transistor para tensões negativas na	
	porta e com $V_{ds}$ parametrizado	44
4.1	6 Gráfico da característica de saída do transistor para tensões negativas entre o dreno	
	e a fonte e com $V_{as}$ parametrizado	45
4.1	7 Gráfico da característica de transferência do transistor para tensões positivas na	
	porta e com $V_{ds}$ parametrizado	46
4.1	8 Gráfico da característica de saída do transistor para tensões positivas entre o dreno	
	e a fonte e com $V_{as}$ parametrizado	47
4.1	9 Gráfico da densidade de cargas livres pela tensão na porta para diferentes densidades	
	de armadilhas de elétrons	48
4.2	0 Gráfico da densidade de cargas livres pela tensão na porta para diferentes densidades	
	de armadilhas de lacunas	49
4.2	1 Gráfico da densidade das cargas pela tensão na porta para diferentes densidades de	
	armadilhas de elétrons	50
4.2	2 Gráfico da densidade das cargas pela tensão na porta para diferentes densidades de	
	armadilhas de lacunas	50
4.2	3 Gráfico da característica de transferência do transistor para tensões positivas na	
	porta com $V_{as} = 5$ V e variando a densidade de armadilhas de elétrons	52
4.2	4 Gráfico da característica de saída do transistor para tensões positivas entre o dreno	
	e a porta com $V_{as} = 5$ V e variando a densidade de armadilhas de elétrons	53
4.2	5 Gráfico da densidade de cargas para diferentes tensões positivas na porta variando	
	o fator $l_n \in N_T = 10^{21} cm^{-3}$	54
4.2	6 Gráfico da densidade de cargas para $V_{as} - V_{TH}$ juntamente com a regressão de	
	potência, para $l_n = 1 \text{ e } N_T = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$	55
4.2	7 Gráfico da densidade de cargas para $V_{qs} - V_{TH}$ juntamente com a regressão de	
	potência, para $l_n = 1,5 \text{ e } N_T = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$	55
4.2	8 Gráfico da densidade de cargas para $V_{qs} - V_{TH}$ juntamente com a regressão de	
	potência, para $l_n = 2 \text{ e } N_T = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ .	56
4.2	9 Gráfico da característica de transferência do transistor para o material P3HT	58
4.3	0 Gráfico da característica de saída do transistor para o material P3HT	58
4.3	1 Gráfico da característica de transferência do transistor para tensões positivas na	
	porta com $V_{ds} = 5$ V, $N_T = 10^{21} cm^{-3}$ e variando o valor do fator $l_n$	61
4.3	2 Gráfico da característica de saída do transistor para tensões positivas na porta com	
	$V_{gs} = 5 \text{ V}, N_T = 10^{21} \text{cm}^{-3}$ e variando o valor do fator $l_n$	62
<b>.</b> .		
1.1	Grâtico da característica de transferência do P3HT com amostras usando a raiz	~ ~
	quadrada da corrente e regressão linear para médio peso molecular	68

I.2	Gráfico da característica de transferência do P3HT com amostras usando regressão	
	não-linear para médio peso molecular	68
I.3	Gráfico da característica de transferência do P3HT com amostras usando a raiz	
	quadrada da corrente e regressão linear para alto peso molecular	69
I.4	Gráfico da característica de transferência do P3HT com amostras usando regressão	
	não-linear para alto peso molecular	69

## LISTA DE TABELAS

Tabela relacionando o comprimento do semicondutor com sua mobilidade	42
Tabela contendo os parâmetros $C_{fit}$ e $V_{TH}$ retirados a partir da tensão na porta e	
da densidade de armadilhas no semicondutor	51
Tabela comparando os parâmetros da regressão de potência para diferentes densi-	
dades de armadilhas e diferentes fatores de temperatura	56
Tabela com resultados das mobilidades extraídas a partir do parâmetro $C_{fit}$	59
	Tabela relacionando o comprimento do semicondutor com sua mobilidade Tabela contendo os parâmetros $C_{fit}$ e $V_{TH}$ retirados a partir da tensão na porta e da densidade de armadilhas no semicondutor Tabela comparando os parâmetros da regressão de potência para diferentes densi- dades de armadilhas e diferentes fatores de temperatura Tabela com resultados das mobilidades extraídas a partir do parâmetro $C_{fit}$

# LISTA DE SÍMBOLOS

### Constantes

d	Comprimento do dielétrico $= 30$	[nm]
e	Número de Euler	
$E_G$	Lacuna de energia entre a banda de condução e a banda de	[eV]
	valência do semicondutor orgânico P3HT = 2	
$E_{G0}$	Lacuna de energia entre a banda de condução e a banda de	[eV]
	valência do silício = $1,2$	
$\epsilon_0$	Permissividade do vácu o $\approx 8,854\times 10^{-14}$	[F/cm]
$\epsilon_d$	Permissividade relativa do dielétrico = $3,9$	
$\epsilon_s$	Permissividade relativa do semicondutor $= 3$	
$arphi_0$	Constante para adequar escalas	
H	Altura do semicondutor no eixo $\boldsymbol{z}$	[cm]
HOMO	Orbital molecular ocupado mais alto	[eV]
k	Constante de Boltzmann $\approx 8,617 \times 10^{-5}$	[eV/K]
$l_n$	Constante característica da distribuição exponencial das ener-	
	gias das armadilhas de elétrons	
$l_p$	Constante característica da distribuição exponencial das ener-	
	gias das armadilhas de lacunas	
L	Comprimento do semicondutor $= 40$	[nm]
LUMO	Orbital molecular inocupado mais baixo	[eV]
$N_V$	Densidade de estados na banda de valência	
$n_i^{Si}$	Densidade de portadores livres do Silício	$[cm^{-3}]$
$n_i^{OSC}$	Densidade de portadores livres do semicondutor orgânico	$[cm^{-3}]$
q	Carga de um elétron = $1, 6 \times 10^{-19}$	[C]
T	Temperatura = 300	[K]
$T_C$	Constante característica da distribuição exponencial das ener-	
	gias das armadilhas	
$V_t$	$kT \approx 0,025$	[V]
W	Espessura da camada isolante do transistor	[nm]

### Variáveis

b	Expoente gerado pela regressão não-linear	
$C_{fit}$	Capacitância por área do <i>fit</i>	$[F/cm^2]$
$C_{ox}$	Capacitância do dielétrico	$[F/cm^2]$
$C_{pot}$	Valor da inclinação da curva da regressão de potência	$[Ccm^{-2}V^{-b}]$
$\Delta z$	Comprimento do semicondutor/Número de pontos usados no	[cm]
	algoritmo	
E	Campo elétrico	[N/C]
$\varphi(1)$	Potencial elétrico na condição de fronteira	[V]
$\varphi(z)$	Potencial elétrico ao longo do semicondutor	[V]
$I_{ds}$	Corrente entre fonte e dreno	[A]
J	Corrente elétrica	[A]
$\mu_n$	Mobilidade elétrica	$[cm^2V^{-1}s^{-1}]$
$\mu_{eff}$	Mobilidade elétrica efetiva	$[cm^2V^{-1}s^{-1}]$
$N_f$	Densidade de elétrons livres	$[cm^{-3}]$
$N_T$	Densidade de armadilhas de elétrons	$[cm^{-3}]$
p	$P_f + P_T + N_f + N_T$	$[cm^{-3}]$
$P_f$	Densidade de lacunas livres	$[cm^{-3}]$
$P_T$	Densidade de armadilhas de lacunas	$[cm^{-3}]$
Q	Densidade de portadores de cargas	$[cm^{-3}]$
V	Tensão elétrica	[V]
$V_{ch}$	Tensão no canal de ligação entre fonte e dreno	[V]
$V_{ds}$	Tensão entre fonte e dreno	[V]
$V_{gs}$	Tensão na porta	[V]
$V_s$	Tensão de superfície	[V]
$V_{TH}$	Tensão limiar de um transistor	[V]
X	Potencial elétrico de acordo com a Equação de Poisson	[V]

### Equações Importantes

Constante de Boltzmann  $\times$  Temperatura

$$V_t = kT \tag{1}$$

Constante para adequar escalas

$$\varphi_0 = \frac{q a^2 n_i^{Si}}{\epsilon_s \epsilon_0} \tag{2}$$

Tensão de Superfície

$$V_s = \frac{V_{gs}}{1 + \frac{\epsilon_s d}{\epsilon_d a}} + \frac{\varphi_1 \varphi_0}{\frac{\epsilon_d a}{\epsilon_s d} + 1}$$
(3)

Densidade de Lacunas e Armadilhas de Lacunas

$$\tilde{p}_z = e^{\frac{-\varphi\varphi_0}{V_t}} \left( 1 + \frac{P_T}{n_i^{OSC}} e^{-\frac{qE_G}{2lV_t}} e^{\frac{l-1}{l}\frac{\varphi\varphi_0}{V_t}} \right)$$
(4)

Densidade de Elétrons e Armadilhas de Elétrons

$$\tilde{n}_z = e^{\frac{\varphi\varphi_0}{V_t}} \left( 1 + \frac{N_T}{n_i^{OSC}} e^{-\frac{qE_G}{2lV_t}} e^{\frac{1-l}{l}\frac{\varphi\varphi_0}{V_t}} \right)$$
(5)

Densidade de Portadores Livres

$$Q = \int p_f - n_f dz \tag{6}$$

Corrente de Deriva

$$J = qp\mu E \tag{7}$$

Equação de Poisson

$$\epsilon \frac{d^2 \varphi(z)}{dz^2} = -q[p(z) - n(z) + P_T(z) - N_T(z)]$$
(8)

Corrente Limitada por Carga Espacial

$$J = \frac{9\epsilon\mu V^2}{8L^3} \tag{9}$$

Densidade de lacunas injetadas e capturadas pelas armadilhas

$$P_{TRAP} = P_T \left(\frac{P_f}{N_V}\right)^{T/T_C} \tag{10}$$

Corrente Limitada pelas Armadilhas

$$J = q^{1-l} \mu N_V \left(\frac{2l+1}{l+1}\right)^{l+1} \left(\frac{\epsilon l}{(l+1) P_{TRAP}}\right)^l \frac{V^{l+1}}{L^{2l+1}}$$
(11)

Fator de Temperatura

$$l = \frac{T_c}{T} \tag{12}$$

Densidade de Portadores em um Semicondutor Orgânico

$$n_i^{OSC} = n_i^{Si} e^{-\frac{E_g - E_{g0}}{2V_t}} \tag{13}$$

Corrente do dreno para a fonte na região de triodo em um MOSFET

$$I_{DS} = \frac{\mu}{L} C_{ox} \left[ (V_g - V_{TH}) V_{DS} - \frac{V_{DS}^2}{2} \right]$$
(14)

Corrente do dreno para a fonte na região de saturação em um MOSFET

$$I_{DS} = \frac{\mu}{L} C_{ox} \frac{\left(V_g - V_{TH}\right)^2}{2}$$
(15)

Capacitância do óxido

$$C_{ox} = \frac{\epsilon_d \epsilon_0}{d} \tag{16}$$

Regressão linear

$$Q = C_{fit} \times (V_{gs} - V_{TH}) \tag{17}$$

Regressão de potência

$$Q = C_{pot} \times V_{eff}^b, \text{ em que } V_{eff} = V_{gs} - V_{TH}$$
(18)

### Capítulo 1

### Introdução

Desde a descoberta do transistor de efeito de campo na Bell Labs em 1947 até os dias de hoje, pode-se dizer que a microeletrônica, apesar de ser recente, é a área de estudo que mais evoluiu desde sua criação. Durante seus primeiros 40 anos, por exemplo, a microeletrônica apresentou um crescimento anual de mercado de aproximadamente 16% em média, fazendo com que se tornasse o maior mercado mundial, com valor total estimado em 1 trilhão de dólares. [3]

Dessa maneira, o transistor se tornou peça fundamental na construção de circuitos integrados (CIs) que podem desempenhar diversas funções. Essa versatilidade é acompanhada pela redução da dimensão de um transistor, que passou de uma escala macroscópica para escala nanométrica nos dias atuais, como previu a Lei de Moore<sup>1</sup>, o que fez com que mais deles fossem agregados para realizar tarefas de alto nível de processamento. Por esse motivo, cada vez mais os esforços estão sendo direcionados para o estudo dos transistores, bem como suas principais características e de como melhorá-los.

O transistor de efeito de campo (FET) é também conhecido por transistor unipolar por conduzir corrente por meio de cargas móveis (elétron e lacuna). A maioria dos FET são constituídos por uma camada de semicondutor cujo material é feito de silício, em que são adicionadas impurezas que podem ser doadoras ou receptoras de elétrons, formando assim ou um semicondutor do tipo p ou do tipo n, respectivamente. O controle do fluxo de portadores é efetuado pelo campo elétrico exercido pela tensão na porta (*gate*) do transistor. Além da porta, o dispositivo contém outros dois eletrodos em contato com o semicondutor: a fonte (*source*) e o dreno (*drain*). Em um semicondutor do tipo p, por exemplo, a fonte faz a injeção dos elétrons livres, enquanto que o dreno drena esses elétrons, como mostra a figura 1.1.

Os transistores de filmes finos (TFT) são uma categoria especial dos FET constituídos pelo depósito de finas camadas de materiais que compõem os FET sobre um substrato não-condutivo, ou seja, são depositados uma camada de semicondutor ativo, uma camada de dielétrico e enfim, os contatos metálicos.[4] Há uma certa diferença entre os TFT e os FET convencionais. Enquanto que os FET funcionam na camada de inversão, os TFT trabalham na camada de enriquecimento.

 $<sup>^1{\</sup>rm Afirmação}$ feita por Gordon E. Moore, em que o número de transistores em um CI dobra a cada 18 meses, em média.



Figura 1.1: Imagem ilustrativa do transistor de efeito de campo do tipo p. Adaptada de [1]

[5]

São várias as aplicações dos transistores de filmes finos, embora a principal delas seja em telas. Eles são aplicados em circuitos de controle de displays planos de matriz ativa, baseados ou em cristais líquidos (LCD) ou em matriz ativa de emissão de luz orgânica por diodos (AMOLED). Para este último caso, também já estão sendo criadas telas flexíveis, graças às propriedades oferecidas pelos materiais orgânicos. Isso evidencia que apesar da maioria dos displays de matriz ativos atuais utilizar silício amorfo, cada vez mais novos tipos de materiais têm sido estudados para ampliar a capacidade dessa tecnologia.[6]

Essa nova tendência é impulsionada pelas grandes perspectivas que a eletrônica orgânica oferece, como produção de dispositivos mais leves, mais finos, transparentes, resistentes e fáceis de manufaturar, o que gera como consequência um baixo custo de produção.[7]

Os avanços nessa área são promissores, visto que cada vez mais os institutos de pesquisa vêm trabalhando em inovações, visando melhorar a qualidade dos componentes eletrônicos produzidos e suas propriedades elétricas. Um exemplo disso é o aumento contínuo da mobilidade dos portadores dos semicondutores orgânicos, pois já existem materiais que superam a mobilidade do silício amorfo (cerca de 1  $cm^2V^{-1}s^{-1}$ ).

Embora haja progressos expressivos na eletrônica orgânica, não se espera que o silício seja completamente substituído no futuro por outros materiais, visto que no geral a eletrônica orgânica ainda fica atrás da eletrônica inorgânica em questão de desempenho, pois existem várias limitações de estabilidade e de presença de armadilhas.[8]

As armadilhas, em poucas palavras, são estruturas que aprisionam as cargas móveis nos semicondutores, reduzindo a mobilidade desses portadores principalmente em condições de baixa tensão. Neste estudo pretende-se verificar o impacto de diferentes distribuições constantes de armadilhas de elétrons e de lacunas presentes no semicondutor orgânico, a fim de gerar resultados referentes à densidade de portadores livres, mobilidade e características de transferência e de saída em diversas situações.

Para isso, o foco estará na implementação de um modelo unidimensional que determina as densidades das cargas e as diferenças de potenciais a partir de um simulador executado na ferramenta matemática MATLAB, utilizando a Equação de Poisson para prover uma solução baseada em cálculos numéricos de álgebra linear.

O capítulo 2 traz uma revisão bibliográfica sobre o funcionamento do TFT, a Equação de Poisson e as correntes limitadas que explicam o movimento das cargas. Em seguida, o capítulo 3 abordará como foi feito o desenvolvimento do modelo, além da implementação da Equação de Poisson. Os resultados da simulação são apresentados e discutidos no capítulo 4 e as considerações finais são feitas no capítulo 5. Por fim, nos anexos estão contidos alguns códigos auxiliares usados na implementação e outros resultados adicionais gerados.

### Capítulo 2

### Revisão Bibliográfica

#### 2.1 Transistores de Filmes Finos Orgânicos

O transistor de filmes finos (TFT) é um transistor de efeito de campo no qual a equação da corrente em função da tensão segue o mesmo padrão do transistor metal-óxido-semicondutor (MOSFET), no entanto, existem divergências entre os dois relacionadas à espessura do semicondutor e ao processo de fabricação.[9] Nos TFT são feitos depósitos sequenciais das estruturas do dispositivo: sobre um substrato isolante, que funciona como suporte, são depositados um filme fino de semicondutor, os contatos metálicos de dreno e fonte, o material isolante e o eletrodo da porta. Para transistores compostos por materiais orgânicos, a principal estrutura usada é a de filmes finos. Isso ocorre devido ao processo de depósito das camadas, que é mais fácil e mais barato de executar, e pela baixa condutividade desses materiais, que por sua vez, garante uma alta resistividade.[10]

Os transistores compostos de silício são divididos em NMOS (canal n) e PMOS (canal p), em que dependendo de como é a dopagem no semicondutor, define-se se a condução é realizada ou por elétrons ou por lacunas. Da mesma maneira, ao se fazer dopagem em transistores orgânicos, estes adquirem capacidade para conduzir carga. Contudo, a grande maioria dos materiais orgânicos são baseados em condução de lacunas em vez de elétrons. Apesar de a partir de um ponto de vista molecular seja mais fácil projetar um semicondutor orgânico rico em elétrons do que um pobre, a maioria desses materiais de tipo-n têm algumas desvantagens, como baixa solubilidade, dificuldade de síntese e baixa estabilidade no ar.[11]

Pode-se afirmar que o transistor orgânico funciona como um capacitor, em que as placas paralelas correspondem ao contato da porta e ao filme delgado orgânico, separados por um material isolante de permissividade relativa  $\epsilon_d$ . Multiplicado à  $\epsilon_d$  está  $\epsilon_0$ , que é a permissividade elétrica do vácuo, igual a  $8,854 \times 10^{-14} F/cm$ . Essa capacitância por área é inversamente proporcional à espessura do dielétrico, como mostra a equação (4.2).

$$C_{ox} = \frac{\epsilon_d \epsilon_0}{d} \tag{2.1}$$

De forma similar a um transistor MOS comum, ao injetar uma tensão na porta  $(V_{gs})$  (considerando que tensão na porta é a tensão entre a porta e a fonte, em que supõe-se que esta é igual à tensão entre a porta e o corpo no substrato), as cargas de sentido oposto presentes na interface óxido-semicondutor se acumulam e formam uma espécie de canal, conectando fonte e dreno. Ao aumentar o potencial no eletrodo da porta, a espessura desse canal também cresce, uma vez que mais cargas opostas são atraídas. A partir dessa análise, o transistor MOS tem dois modos de operação: depleção e acumulação. O modo depleção ocorre quando há uma redução do canal entre dreno e fonte previamente existente, o que garante condução de corrente mesmo quando a tensão na porta é nula, enquanto que o modo acumulação remete à criação e ao aumento do canal, não conduzindo corrente quando a tensão na porta é baixa. O modo que será abordado neste estudo será o de enriquecimento, como ilustrado na figura 3.1.[10]

Em um transistor de canal n, quando uma tensão  $V_{gs}$  aplicada consegue atrair portadores suficientes para formar um canal de condução entre fonte e dreno, denomina-se que essa é a tensão de limiar  $V_{TH}$  (threshold voltage, em inglês). No momento que  $V_{gs}$  é maior do que  $V_{TH}$ , o canal se torna mais espesso, operando como um resistor linear. À medida que a tensão entre fonte e dreno ( $V_{ds}$ ) é intensificada, esse canal fica mais estreito e a sua resistência aumenta. Quando  $V_{ds}$ alcança o valor em que a diferença entre a tensão na porta e a tensão no dreno é igual a  $V_{TH}$ , a espessura do canal no final do dreno aproxima-se de zero e desta forma, fica estrangulado.[2]



Figura 2.1: Imagem il<br/>ustrativa de transistor tipo-n em modo enriquecimento quando aplica-se uma tensão<br/>  $V_{ds}$ . Adaptada de [2]

A tensão  $V_{ds}$  e a tensão onde há estrangulamento fazem parte da região de saturação do transistor, em que o aumento de  $V_{ds}$  não surte mais efeito no canal e portanto, a corrente se mantém constante. Valores de  $V_{ds}$  menores fazem parte da região de triodo, em que primeiramente o transistor se comporta como um resistor linear e quanto mais fino o canal fica, maior é a resistência e assim, menor é o crescimento da corrente em relação à tensão da porta. Quando  $V_{qs}$ 

é menor do que a tensão de limiar, estabelece-se que esta é a região de corte, onde a corrente é praticamente nula.

A figura 2.2 mostra como é a característica de transferência de um transistor em modo acumulação, com  $V_{gs} > V_{TH}$ .



Figura 2.2: Curva de transferência de um transistor tipo-n em modo acumulação, para regiões de triodo e saturação. Adaptada de [2]

Quando  $V_{gs} > V_{TH} \in V_{gs}$  -  $V_{TH} > V_{ds}$ , a densidade de cargas livres por área é dependente da tensão na porta, como aborda a equação (2.2).

$$Q = C_{ox}(V_{qs} - V_t) \tag{2.2}$$

Considerando a concentração de cargas ao longo do canal de ligação entre fonte e dreno no semicondutor, introduz-se na equação (2.2) a tensão dependente da posição y no canal, cujo valor mínimo é 0 e o valor máximo é  $V_{ds}$ :

$$Q(y) = C_{ox}[V_{gs} - V_t - V_{ch}(y)]$$
(2.3)

A densidade de corrente de deriva, apresentada na equação (2.4) e que será melhor explicada na seção 2.3.1, explica como funciona o fluxo (corrente) das cargas pelo semicondutor, em que q é a carga de um elétron, p representa a densidade de cargas livres,  $\mu_n$  é a mobilidade e E equivale ao campo elétrico nas posições entre fonte e dreno. A mobilidade é a razão entre a velocidade dos portadores e o campo elétrico. A densidade de corrente é dada por  $A/cm^2$ , pois uma vez que a corrente é constante por toda a extensão entre fonte e dreno, ela deve ser dividida pelo produto de H (altura do semicondutor) por W (espessura do semicondutor), como está explícito em (2.5).

$$J = qp\mu_n E(y) \tag{2.4}$$

$$J = \frac{I_{ds}(y)}{HW} \tag{2.5}$$

Dado que o campo elétrico refere-se à variação da tensão pela posição, como mostrado em (2.6), a equação (2.4) se transforma em (2.8):[12]

$$E(y) = -\frac{dV_{ch}}{dy} \tag{2.6}$$

$$J = -qp\mu_n \frac{dV_{ch}}{dy} \tag{2.7}$$

Para introduzir Q(y) na equação (2.8), é necessário fazer uma adaptação no sentido de grandezas. Ao lembrar que Q(y) é a densidade por área de cargas ao longo do canal de ligação entre fonte e dreno, verifica-se que é necessário dividir Q(y) pela altura H, a fim de se obter uma concentração por volume. Substituindo o produto qp por  $\frac{Q(y)}{H}$  em (2.8), em que qp corresponde à densidade de cargas por  $cm^3$ , se tem:

$$J = -\mu_n \frac{Q(y)}{H} \frac{dV_{ch}}{dy}$$
(2.8)

Como a corrente  $I_{ds}$  é constante para qualquer posição y do semicondutor entre fonte e dreno, é perfeitamente aceitável escrevê-la de outra maneira, pois não há uma dependência de  $I_{ds}$  em relação a y. A equação (2.9) revela a prova disso, em que a constante L se refere ao comprimento do filme fino na direção y.

$$I_{ds} = \frac{1}{L} \int_0^L I_{ds} \, dy = \frac{I_{ds}}{L} \int_0^L dy = I_{ds}$$
(2.9)

Fazendo todas as modificações descritas acima, a nova equação da corrente entre fonte e dreno ganha outra forma:

$$I_{ds} = -\mu_n Q(y) W \frac{dV_{ch}}{dy} \tag{2.10}$$

Substituindo  $I_{ds}$  em (2.9), a corrente é descrita por uma integral:

$$I_{ds} = \frac{1}{L} \int_{0}^{L} -\mu_n Q(y) W \frac{dV_{ch}}{dy} \, dy$$
 (2.11)

Inserindo a equação (2.3) em (2.11) e colocando os termos independentes de y para fora da integral, se tem:

$$I_{ds} = -\mu_n \frac{W}{L} C_{ox} \int_0^L [V_{gs} - V_{TH} - V_{ch}(y)] \frac{dV_{ch}}{dy} dy$$
(2.12)

Utilizando o método de substituição em integrais, é possível fazer a mudança de variáveis de dy para  $dV_{ch}$ . Logo:

$$I_{ds} = -\mu_n \frac{W}{L} C_{ox} \int_0^{V_{ds}} V_{gs} - V_{TH} - V_{ch} \, dV_{ch}$$
(2.13)

A partir deste ponto, a resolução da integral se torna muito mais simples. A equação final para a corrente entre fonte e dreno em modo triodo, é representada pela expressão (2.14).

$$I_{ds} = -\mu_n \frac{W}{L} C_{ox} [(V_{gs} - V_{TH}) V_{ds} - \frac{V_{ds}^2}{2}]$$
(2.14)

Para o modo saturação, em que  $V_{gs} > V_{TH}$  e  $V_{gs} - V_{TH} < V_{ds}$ , troca-se na equação (2.2) a expressão  $V_{gs} - V_{TH}$  por  $V_{ch}(y)$ , em que este é dependente da posição y no canal:

$$Q(y) = C_{ox}[V_{ch}(y)]$$
(2.15)

Fazendo os passos no modo saturação equivalentes ao que foram feitos no modo triodo, a equação (2.11) se torna uma integral que contém apenas a tensão de canal dependente da posição como parâmetro, como está descrito em (2.16).

$$I_{ds} = -\mu_n \frac{W}{L} C_{ox} \int_0^L V_{ch}(y) \frac{dV_{ch}}{dy} \, dy$$
 (2.16)

Fazendo novamente a substituição de variáveis na integral e resolvendo os cálculos numéricos, a equação da corrente entre dreno e fonte no modo saturação tem a seguinte forma:

$$I_{ds} = \frac{\mu W}{L} C_{ox} \frac{(V_{gs} - V_{TH})^2}{2}$$
(2.17)

Nos materiais orgânicos, a mobilidade dos portadores normalmente é baixa comparada a dos semicondutores inorgânicos. Como já foi mencionado, ela é aproximadamente 1  $cm^2V^{-1}s^{-1}$ , enquanto em alguns materiais inorgânicos esse valor pode chegar a  $10^6 cm^2V^{-1}s^{-1}$ , o que explica o porquê de os dispositivos construídos com materiais orgânicos geralmente terem menor velocidade de resposta.

Esse problema, aliado à grande quantidade de deformidades na estrutura e às impurezas contidas em materiais orgânicos, criam armadilhas que aprisionam os portadores de carga. Dessa maneira, há uma diminuição no fluxo de corrente entre fonte e dreno em um transistor, porque por mais que haja uma tensão considerável na porta e mais cargas sejam injetadas, várias cargas ainda serão aprisionadas e consequentemente, menos cargas móveis vão conseguir atravessar o canal.[13]

Isso faz com que a mobilidade empregada nas equações (2.14) e (2.17) não seja mais representada por  $\mu_n$ , mas sim por  $\mu_{eff}$ , que é a mobilidade efetiva. Esse parâmetro é diretamente influenciado pela razão entre a densidade de cargas livres e cargas totais, em que esta é equivalente à soma das cargas livres e das cargas aprisionadas.

### 2.2 Equação de Poisson

O comportamento elétrico de dispositivos constituídos por semicondutores pode ser explicado pela Equação de Poisson. Em um material com permissividade  $\epsilon$  e que contenha uma distribuição de cargas p, é possível determinar o potencial eletrostático  $\varphi$  em qualquer região do semicondutor a partir do campo elétrico. A equação (2.18) mostra que o campo elétrico pode ser obtido através do gradiente de  $\varphi$ .

$$\overrightarrow{E} = -\overrightarrow{\nabla}\varphi \tag{2.18}$$

Em coordenadas cartesianas, o gradiente escalar de uma função corresponde a: [14] [12]

$$\nabla \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{\partial \varphi}{\partial z}$$
(2.19)

Considerando que o semicondutor tem uma altura L ao longo de um eixo z, para um modelo unidimensional da Equação de Poisson, as coordenadas  $x \in y$  são descartadas. Assim, o campo elétrico escalar no eixo z é mostrado na equação (2.20):

$$E = -\frac{\partial\varphi}{\partial z} \tag{2.20}$$

Dependendo do tipo de semicondutor e dos contatos de fonte e dreno a ser considerados, a distribuição de cargas podem descrever lacunas, elétrons ou os dois.[15] No entanto, na maioria dos casos, a distribuição de cargas p não é conhecida previamente. A princípio, a densidade de portadores é determinada pela expressão (2.21), em que p(z) é a densidade de lacunas, n(z) se refere à densidade de elétrons,  $P_T(z)$  corresponde à concentração de armadilhas de lacunas e  $N_T(z)$  é igual à densidade de armadilhas de elétrons:

$$p = q[p_f(z) - n_f(z) + P_T - N_T]$$
(2.21)

A Equação de Poisson é dada pela equação abaixo, dependente de  $\epsilon$  e de p:

$$\nabla^2 E = -\frac{p}{\epsilon} \tag{2.22}$$

Ao mesclar as equações (2.20), (2.21) e (2.22), chega-se à Equação de Poisson adaptada para uma dimensão:

$$\frac{\partial^2 \varphi(z)}{\partial z^2} = -\frac{q}{\epsilon} [p(z) - n(z) + P_T(z) - N_T(z)]$$
(2.23)

Entretanto, como em toda equação diferencial parcial de segunda ordem, é necessário obter mais informações sobre ela para que seja possível encontrar sua solução. Para isso, são especificadas as condições de fronteira, também conhecidas como condições de contorno, em que os valores do potencial em dois pontos extremos da região fechada semicondutora são estabelecidos, a fim de que haja unicidade na solução da Equação de Poisson. Por exemplo, considerando uma estrutura MOS, para os pontos 0 e z do semicondutor, os potenciais têm os seguintes resultados:

$$\varphi(0) = V_s \qquad \varphi(z) = 0 \tag{2.24}$$

Nessa situação, a tensão na fronteira do dielétrico com o início do semicondutor é igual à tensão na porta, enquanto que a tensão no final do filme é igual a zero. Esse tipo de condição de fronteira é chamado de condição de fronteira de Dirichlet, no qual os valores extremos são especificados diretamente.[16] Assim, ao delimitar esses dois potenciais, possibilita-se achar o resultado que define o comportamento da tensão entre um ponto do semicondutor e o último, por toda sua extensão.

Tendo em posse a solução do potencial, é possível encontrar o campo elétrico simplesmente por aplicar a equação (2.20) e também determinar as densidades das cargas livres e capturadas, que serão apresentadas adiante na seção 2.3.

#### 2.3 Diodos de portadores únicos

#### 2.3.1 Corrente Limitada pela Carga Espacial

Em um semicondutor existem dois mecanismos responsáveis pelo movimento dos elétrons e das lacunas: a difusão e a deriva. A difusão está associada à agitação térmica dos átomos, no qual as cargas livres difundem-se da região de maior concentração para de menor concentração, resultando em um fluxo de carga que gera uma corrente de difusão. O processo de deriva de portadores ocorre quando existe um campo elétrico aplicado no semicondutor, que por sua vez acelera as lacunas e os elétrons. As lacunas movem-se no mesmo sentido do campo, enquanto os elétrons movimentam-se no sentido oposto ao campo elétrico. Contudo, ao considerar os sinais das cargas, verifica-se que ambos os portadores transportam corrente no mesmo sentido. Desta forma, a densidade de corrente total depende das correntes de difusão e de deriva.

Em regime estacionário, a corrente total é a mesma em qualquer seção do material, sendo independente da posição. [17] No caso dos semicondutores orgânicos em estudo, a corrente de difusão será desprezada, pois só serão considerados os portadores provenientes da injeção do contato com o eletrodo. Além disso, nesse sistema não se tem nenhuma inserção de impurezas de maneira intencional, considerando assim apenas a corrente de deriva dependente do campo elétrico.

Considerando apenas lacunas ou elétrons no sistema (o resultado final é o mesmo para ambos), dispõe-se a seguir a expressão para a corrente de deriva, em que q é a carga elementar, p representa a densidade de cargas livres,  $\mu$  é a mobílidade e E equivale ao campo elétrico:

$$J = qp\mu E \tag{2.25}$$

Usando a Equação de Poisson e combinando com a equação (2.25), a densidade de cargas livres é cancelada:

$$J = \frac{\epsilon \mu}{2} \frac{dE^2}{dx} \tag{2.26}$$

Ao integrar essa expressão de 0 a x e assumindo que o campo elétrico na posição x = 0 seja 0, se tem:

$$Jx = \frac{\epsilon\mu}{2}E^2(x) \tag{2.27}$$

De acordo com a seguinte relação entre a tensão elétrica e o campo elétrico, onde L é o comprimento do semicondutor,  $V(0) = V \in V(L) = 0$ , encontra-se:

$$V = \int_{0}^{L} E(x)dx = \sqrt{\frac{2J}{\epsilon\mu}} \frac{L^{3/2}}{3/2}$$
(2.28)

Fazendo as adaptações matemáticas necessárias na equação (2.28), a expressão da corrente limitada por carga espacial (SCLC - Space Charge Limited Current), conhecida também como Lei de Mott-Gurney:

$$J = \frac{9\epsilon\mu V^2}{8L^3} \tag{2.29}$$

#### 2.3.2 Corrente Limitada pelas Armadilhas

Quando as armadilhas estão distribuídas exponencialmente pela banda proibida, a maioria das cargas não contribuirá para o transporte da corrente pelo semicondutor, ou seja, o valor e a dependência da tensão por parte da corrente estão diretamente relacionadas à densidade e à distribuição das armadilhas pelas bandas de energia.

Por causa disso, considerando apenas elétrons ou lacunas, pode-se definir a densidade de lacunas injetadas e capturadas pelas armadilhas como:

$$P_{TRAP} = P_T \left(\frac{P_f}{N_V}\right)^{T/T_C} \tag{2.30}$$

Em que  $P_T$  é a densidade de armadilhas de lacunas,  $P_f$  é a densidade de lacunas livres,  $N_V$  é a densidade de estados na banda de valência, T se refere à temperatura e  $T_C$  corresponde à constante característica da distribuição.

Levando em conta a Equação de Poisson combinada à equação (2.30), tem-se:

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{q}{\epsilon} P_T \left(\frac{P_f}{N_V}\right)^{1/l} \tag{2.31}$$

O fator l introduzido em (2.31) é determinado pela equação (2.32), em que  $T_c$  é a temperatura característica da distribuição exponencial das energias das armadilhas e T é a temperatura ambiente no sistema.

$$l = \frac{T_c}{T} \tag{2.32}$$

Ao substituir  $P_f$  pela equação da corrente de deriva (2.25), a equação a seguir ganha outra forma:

$$E^{1/l}\frac{dE}{dx} = -\frac{q}{\epsilon}\frac{P_T}{N_V^{1/l}}\left(\frac{J}{q\mu}\right)^{1/l} \tag{2.33}$$

Considerando que:

$$\frac{dE^{\frac{l+1}{l}}}{dx} = \left(\frac{1}{l} + 1\right)E^{1/l}\frac{dE}{dx}$$
(2.34)

Então a equação (2.33) se transforma em:

$$\frac{dE^{\frac{l+1}{l}}}{dx} = -\frac{q}{\epsilon} \frac{P_T}{N_V^{1/l}} \left(\frac{J}{q\mu}\right)^{1/l} \left(\frac{l+1}{l}\right)$$
(2.35)

A integração da equação (2.35) por todo o comprimento do semicondutor tem como resultado:

$$E^{\frac{1}{l}+1}(x) = -\frac{q}{\epsilon} \frac{P_T}{N_V^{\frac{1}{l}}} \left(\frac{J}{q\mu}\right)^{\frac{1}{l}} \left(\frac{l+1}{l}\right) x$$
(2.36)

Utilizando a condição de fronteira  $V = -\int_0^L E(x)dx$ , o campo elétrico é retirado da equação e é substituído pela tensão aplicada:

$$V = \left[\frac{q}{\epsilon} \frac{l+1}{l} \frac{P_T}{N_V^{1/l}} \left(\frac{J}{q\mu}\right)^{1/l}\right]^{\frac{l}{l+1}} \left(\frac{l+1}{2l+1}\right) L^{\frac{2l+1}{l+1}}$$
(2.37)

Fazendo os ajustes necessários para que se estabeleça a corrente limitada pelas armadilhas (TLC - Trap Limited Current) em função da tensão aplicada e do comprimento do semicondutor, o resultado final é:

$$J = q^{1-l} \mu N_V \left(\frac{2l+1}{l+1}\right)^{l+1} \left(\frac{\epsilon l}{(l+1)P_T}\right)^l \frac{V^{l+1}}{L^{2l+1}}$$
(2.38)

Para que essa lei seja obedecida, l necessariamente tem que ser maior do que 1. [18]

### Capítulo 3

### Desenvolvimento

### 3.1 Introdução

O transistor de filmes finos orgânico (OTFT) a ser estudado foi dividido apenas em porta, dielétrico e semicondutor (contendo os contatos metálicos fonte e dreno) em formato top-gate/bottomcontact, como descrito na imagem 3.1, para simplificar a esquematização do problema.

A partir da tensão aplicada na porta, haverá uma queda de potencial no semicondutor devido à presença do material isolante, que servirá como uma barreira para as cargas móveis que fluem ao longo do eixo z do dispositivo. Quanto maior a tensão na porta, maior é a densidade de portadores livres na região próxima à interface com o isolante e desta forma, maior é o fluxo de corrente no semicondutor entre fonte e dreno.



Figura 3.1: Imagem ilustrativa do transistor de filmes finos considerado no estudo Nas subseções a seguir estão descritos os métodos usados para implementar a Equação de

Poisson. Primeiramente, é proposto um método de discretização da equação com vista em facilitar os cálculos. A seguir, é feita uma comparação de uma situação hipotética entre os algoritmos analíticos e discretos, a fim de provar que a técnica usada produz um resultado muito semelhante ou igual ao que é desejado alcançar. Finalmente, é executada a implementação do algoritmo da Equação de Poisson, esclarecendo quais fórmulas foram usadas e quais estratégias foram escolhidas para alcançar os melhores resultados.

### 3.2 Implementação da Equação de Poisson

A implementação da Equação de Poisson usando cálculos puramente analíticos é consideravelmente complexa e exige muito poder computacional, devido às integrações de equações grandes e de equações diferenciais parciais analíticas, à complexidade da região trabalhada, aos coeficientes da equação diferencial que podem variar de ponto a ponto e por serem às vezes problemas não-lineares que dependem de suas própria soluções.

Pelo fato de ter funções complicadas, o mais indicado para solucionar problemas desse tipo é apelar para aproximações, que não representam fielmente o resultado, porém conseguem estimá-lo bem.

Por esse motivo, foi adotado o método de diferenças finitas para discretização da Equação de Poisson, usando soluções numéricas oriundas da solução do sistema de equações lineares. Esse sistema é uma aproximação para a solução da Equação de Poisson em um subconjunto de pontos da região trabalhada.[19]

#### 3.2.1 Discretização da Equação de Poisson

Para ser possível a discretização da Equação de Poisson, foi necessário trabalhar com variáveis adimensionais, ou seja, sem grandeza física, pois desta forma o cálculo numérico poderia ser efetuado e apenas no final os operandos converter-se-iam em elementos com significado físico. Além disso, devido ao uso de números muito pequenos e muito grandes, para a carga elementar e para as densidades de cargas, por exemplo, houve a necessidade de se adequar as escalas a um padrão, a fim de que a grande variação das grandezas não surtisse tanto efeito nos valores numéricos.

A discretização é formada por uma combinação de funções lineares a partir de cada ponto, ou seja, ao definir o número de pontos a serem amostrados, cada ponto terá uma função linear dependente do ponto anterior, do ponto atual e do ponto seguinte. Portanto, o conjunto das equações formará um sistema linear, semelhante a uma malha de uma dimensão:

$$\begin{cases}
i = 1 & -\frac{0-2u_1+u_2}{(\Delta z^2)} = f_1 \\
i = 2 & -\frac{u_1-2u_2+u_3}{(\Delta z^2)} = f_2 \\
i = 3 & -\frac{u_2-2u_3+u_4}{(\Delta z^2)} = f_3 \\
\vdots \\
i = N-1 & -\frac{u_{N-2}-2u_{N-1}}{(\Delta z^2)} = f_{N-1}
\end{cases}$$

Adotando a notação de matrizes, o sistema linear adquire a forma Au = F, em que  $A \in \mathbb{R}^{N-1 \times N-1}$  e  $u, F \in \mathbb{R}^{N-1}$ . A matriz A também é simétrica positiva e portanto, inversível.[20]

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & -1 & 2 & -1 \\ & & \dots & \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix}, u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_{N-1} \end{pmatrix}$$

Aplicando a condição de fronteira não-homogênea descrita por Dirichlet[16], apenas a matriz F sofre alterações em seu primeiro elemento. No simulador isso se refere à superfície do semicondutor, que possui uma tensão  $V_s$ , também chamada de potencial de superfície.

$$u(0) = g_0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{2u_1 - u_2}{(\Delta z)^2} = f_1 + \frac{g_0}{(\Delta z)^2} \tag{3.1}$$

Nesse caso,  $g_0$  é substituída pelo potencial de superfície, que corresponde ao primeiro ponto da simulação. É importante frisar que como a tensão de superfície tem uma grandeza física [V], ela tem que ser adaptada para ser adimensional. Para fazer isso,  $V_s$  tem que ser dividida por uma constante  $\varphi_0$  que necessariamente tem que possuir uma escala em Volts. Essa constante pode ser determinada a partir da Equação de Poisson original mostrada em (2.23), em que o elemento  $n_i^{Si}$  representa uma densidade constante para a soma dos elétrons e lacunas livres e armadilhas. Os outros elementos dessa equação também devem ser apenas números, sem dimensão, e por este motivo estão representados de maneira diferente da original com um sinal de "til" sobre eles, como descrevem as expressões abaixo.

$$\frac{d^2\tilde{\varphi}(z)}{d\tilde{z}^2} = -\tilde{p} \tag{3.2}$$

$$\tilde{\varphi} = \varphi_0 \varphi \qquad \tilde{z} = z \Delta z \qquad \tilde{p} = p n_i^{Si}$$

$$(3.3)$$

A equação (3.2) é uma forma simplificada numérica da equação (2.23), e por isso não contém a permissividade do material e a carga elementar de um elétron, que possuem dimensões. Substituindo o numerador da segunda derivada por uma das equações do sistema linear mencionado acima e o denominador por  $(\Delta z)^2$ , a equação a seguir torna a ter grandezas, e por este motivo, a permissividade  $\epsilon$  e a carga elementar q são adicionadas a fim de manter o equilíbrio das grandezas:

$$-\epsilon \frac{u_{N-2} - 2u_{N-1}}{(\Delta z^2)} = -qn_i^{Si}$$
(3.4)

O elemento  $\Delta z$  corresponde ao quociente do comprimento do semicondutor L pelo número de pontos usados na simulação do algoritmo, como mostra a equação abaixo.

$$\Delta z = \frac{L}{n} \tag{3.5}$$

Fazendo ajustes matemáticos, o cálculo fica da seguinte maneira:

$$u_{N-2} - 2u_{N-1} = \frac{q \left(\Delta z^2\right) n_i^{Si}}{\epsilon}$$
(3.6)

Como o lado esquerdo da equação tem grandeza em Volts, o lado direito obrigatoriamente também tem que estar na mesma escala. Substituindo  $\epsilon$  pelo produto das permissividade do vácuo e do material, a constante de escala resulta em:

$$\varphi_0 = \frac{q \left(\Delta z\right)^2 n_i^{Si}}{\epsilon_s \epsilon_0} \tag{3.7}$$

Ao instanciar  $n_i^{Si}$  com o valor de  $10^{10} \ cm^{-3}$ , comprimento do semicondutor de 40nm e 400 pontos de amostra, conforme presente nas simulações subsequentes, a constante  $\varphi_0$  tem o seguinte valor:

$$\varphi_0 = \frac{q \left(\Delta z\right)^2 n_i^{Si}}{\epsilon_s \epsilon_0} = 6,189 \times 10^{-22} \tag{3.8}$$

### 3.2.2 Comparação dos cálculos analíticos e numéricos para uma densidade linear de portadores

Para provar que os cálculos numéricos produzem os mesmos resultados que os cálculos analíticos, foram feitos dois programas em linguagem MATLAB usando essas duas abordagens. Nos dois casos foi utilizado um perfil linear de densidade de portadores, dependente do comprimento do semicondutor L ao longo do eixo z, em que  $n_i^{Si}$  equivale à concentração de portadores livres:

$$p(z) = n_i^{Si} \left( 1 - \frac{z}{L} \right) \tag{3.9}$$

Desenvolvendo a Equação de Poisson usando essa densidade, o potencial assume a seguinte forma:

$$\varphi(z) = \varphi_0 \left( -\frac{z^3}{6} + \frac{z^2}{2} + c_1 z + c_2 \right)$$
(3.10)

O fator  $\varphi_0$  citado em (3.7) se refere à constante usada para adaptar a equação à escala correta. Utilizando as condições de fronteira a seguir, é possível substituir as constantes  $c_1$  e  $c_2$  e resolver a equação, no qual  $V_s$  é o potencial de superfície.

$$\varphi_0 = \frac{\epsilon_s \epsilon_0 \left(\Delta z\right)^2}{q n_i^{Si}} \tag{3.11}$$

$$\varphi(0) = V_s \qquad \varphi(L) = 0 \tag{3.12}$$

A primeira condição limiar está relacionada à tensão na superfície do semicondutor em contato com o isolante, em que sua magnitude é igual a  $V_s$ , enquanto que a segunda condição ocorre no final do semicondutor de comprimento L, onde foi considerada uma tensão igual a zero para pontos fora do corpo do transistor.

O código completo usando cálculo analítico está disposto abaixo:

```
function X = poisson_scaled_analytic(n,Vs)
% Constants
% Electron charge (elementary charge)
q = 1.6*10^(-19); % C
% Carrier concentration
p0 = 10^20; % cm^-3
% Semiconductor permittivity
Es = 11.7;
% Vacuum permittivity
E0 = 8.854 * 10^ (-14); % F/cm
% Semiconductor length
L = 40 \times 10^{(-7)}; \% cm
% Interval (step) length
a = L/n;
% Scale factor calculation
phi0 = (q*a.^2*p0)/(Es*E0);
% Constants
c2 = -Vs/phi0;
c1 = -c2/n - n/3;
% Linear profile
ztil = ones(n-1,1);
for i = 1:n-1
    ztil(i) = i;
end
% Main equation (unscaled)
phitil = ztil.^3/(6*n) - ztil.^2/2 - c1*ztil - c2;
% Scaling
```

```
z = a*ztil*10^7;
phi = phitil*phi0;
% Plot code
plot(z,phi);
ylabel('Phi/V','fontsize',18);
xlabel('x/nm','fontsize',18);
```

O programa produz a solução analítica mostrada na figura 3.2.



Figura 3.2: Soluções analítica e numérica usando 50 pontos e tensão de superfície igual a -2 V

Por outro lado, o cálculo numérico utiliza das matrizes citadas na seção 3.2.1 e das condições de fronteira descritas na equação (3.12). A matriz F contém o perfil linear citado na fórmula (3.9). O código desta versão está descrito abaixo:

```
function X = poisson_scaled_numeric(n,Vs)
% Constantes
% Electron charge (elementary charge)
q = 1.6*10^(-19); % C
% Carrier concentration
p0 = 10^20; % cm^-3
% Semiconductor permittivity
Es = 11.7;
% Vacuum permittivity
E0 = 8.854*10^(-14);% F/cm
% Semiconductor length
```

```
L = 40 \times 10^{(-7)}; \% cm
% Interval (step) length
a = L/n; % cm
% Scale factor calculation
phi0 = (p0*q*a^2) / (Es*E0);
% Poisson matrix generation
A = gera_matriz(n-1);
% Linear profile
F = ones(n-1, 1);
xx = ones(n-1, 1);
for i = 1:n-1
    F(i) = 1 - i/n;
    xx(i) = i;
end
% Boundary condition
F(1) = F(1) + Vs/phi0;
% Poisson Equation solution
X = inv(A) *F;
% Scaling
phi = phi0*X;% phi in V
xx = 10^(7) *a*xx; % xx in nm
```

Esse programa gerou o mesmo resultado da versão analítica, provando portanto que a discretização também é efetiva em determinar o resultado da Equação de Poisson.

### 3.3 Descrição dos Algoritmos usando MATLAB

A Equação de Poisson, usando densidade linear de cargas livres reportada na seção anterior, considera a tensão de superfície  $V_s$  como um valor de entrada constante, que apenas é um fator no cálculo da condição limiar. No entanto, isso não condiz com a realidade, em que esse valor sofre variação a partir do comportamento da tensão na porta do transistor.

Além disso, a densidade de portadores era definida apenas pelo parâmetro  $n_i^{Si}$  constante, para silício intrínseco. Os novos algoritmos, no entanto, contêm duas equações exponenciais para o cálculo dos portadores, sejam estes cargas móveis ou armadilhas. Desta forma, a concentração dos portadores de cargas em um certo ponto do semicondutor depende também do potencial eletrostático naquela posição.

Com o propósito de avaliar as características do transistor de maneira mais adequada, foram criados dois códigos que executam basicamente as mesmas operações, porém um atua com tensões negativas na porta e outro com tensões positivas. Para a explicação do funcionamento do algoritmo, será mostrada apenas a versão com tensões negativas na porta, enquanto que o código
da versão com tensões positivas está em anexo no Apêndice.

#### 3.3.1 Pré-calculos do algoritmo

Antes da parte efetiva do algoritmo, a declaração das constantes e a inicialização das variáveis a serem utilizadas são efetuadas. Nesta versão foram adicionadas as densidades das armadilhas de elétrons e lacunas, como também foram feitas as declarações da tensão da porta e da tensão de superfície.

O algoritmo de simulação do impacto das armadilhas no dispositivo tem o número de pontos discretos e o fator de distribuição exponencial das energias de armadilhas l como parâmetros de entrada. Este último é separado em  $l_p$  e  $l_n$ , que são os fatores para lacunas e elétrons, respectivamente, pois como descreve a equação (2.32), a constante  $T_c$  é definida pela característica da distribuição exponencial das energias das armadilhas ao longo da banda proibida de energia. [21]

Ao invés de usar  $n_i^{Si}$ , que é a densidade de portadores no silício intrínseco, o programa usará a constante  $n_i^{OSC}$ , que simboliza a densidade de portadores em um semicondutor orgânico, mostrada na equação (3.13). Essa concentração de cargas móveis é dependente da banda proibida de energia do material orgânico e da banda de energia do silício, que é intrínseca e fixa para cada material. Para o cálculo serão usados como base o P3HT (Poly(3-hexylthiophene-2,5-diyl) ou poli(3-hexiltiofeno-2,5-dil), em português), com banda de energia  $E_g$  equivalente a 2 eV e o silício, com banda de energia  $E_{g0}$  igual a 1,2 eV.

$$n_i^{OSC} = n_i^{Si} e^{-\frac{E_g - E_{g0}}{2V_t}}$$
(3.13)

 $V_t$  é conhecido por ser uma constante de origem térmica, dado em [V], como mostra a equação (3.14), no qual k é a constante de Boltzmann, igual a  $1,38 \times 10^{-23}$  J/K ou  $8,617 \times 10^{-5}$  eV/K. Quando k é dado em eV, a carga elementar q é retirada da equação.

$$V_t = \frac{kT}{q} \tag{3.14}$$

As constantes usadas no algoritmo estão dispostas abaixo, junto com suas descrições e suas respectivas unidades em formato de comentário. As densidades de armadilhas de elétrons e de lacunas também já estão definidas, porém como a análise dos resultados num primeiro momento é feita hipoteticamente em um sistema livre de armadilhas, os valores de  $P_T$  e  $N_T$  são iguais a zero. Além disso, há a inicialização dos contadores e das variáveis de saída dos laços de repetição.

```
function negative_Vgs_simulator(n,lp,ln)
% This is a simulator of an one-dimensional Poisson's Equation for negative gate voltages.
% n is the number of sampled points
% lp is the temperature factor for holes (1 <= lp <= 2)
% ln is the temperature factor for electrons (1 <= ln <= 2)</pre>
```

```
% Constants
```

```
% Electron charge (elementary charge)
q = 1.6*10^(-19); % C
% Silicon intrinsic density of electrons and holes
niSi = 10^(10); % cm^-3
% Silicon Energy Band Gap
Eg0 = 1.2; % eV
% Organic Semiconductor Energy Band Gap (P3HT)
Eq = 2; % eV
% Dielectric relative permittivity (SiO2)
Ed = 3.9;
% Semiconductor relative permittivity (P3HT)
Es = 3;
% Vacuum permittivity
E0 = 8.854*10^(-14);% F/cm
% Semiconductor length
L = 40 * 10^{(-7)}; % cm
% Dielectric length
d = 30 \times 10^{(-7)}; \% cm
% Interval (step) length
a = L/n;
% Gate voltage
Vgs = 0.001; % V
% Boltzmann constant
%Boltzmann = 1.38*10^(-23); % J/K
Boltzmann = 8.617*10^(-5); % eV/K
% Temperature
T = 300; %K
% Positive-charged trap density
%Pt = 0;
Pt = 10^(22); %cm^-3
% Negative-charged trap density
Nt = 0;
%Nt = 8*10^(20); %cm^-3
% Counters and variable initializations
erro = 1;
erropz = 1;
erronz = 1;
k = 1;
graphcount = 1;
% Initialization of surface voltage variable
Vs = Vgs;
```

Também são feitos os cálculos de  $V_t$ , da concentração de portadores para o semicondutor orgânico (P3HT) e da constante de escala de tensão:

```
% Boltzmann constant multiplied by the temperature
Vt = Boltzmann*T; % V
```

```
% Organic semiconductor carrier concentration
niOSC = niSi*exp(-(Eg - Eg0)/(2*Vt));
% Scale factor calculation
phi0 = (q*a.^2*niOSC)/(Es*E0);
```

Para o preparo da primeira iteração, cria-se a matriz de discretização da Equação de Poisson ilustrada na seção 3.2.1, a partir da função secundária gera\_matriz(n), que está em anexo no Apêndice. Além disso, são inicializados os vetores ao longo do semicondutor que serão usados na sequência do algoritmo.

```
% Poisson Matrix generation
A = create_matrix(n-1);
% Initialization of Matrices
F = ones(n-1,1);
xx = ones(n-1,1);
X = ones(n-1,1);
nz = ones(n-1,1);
pz = ones(n-1,1);
nf = ones(n-1,1);
pf = ones(n-1,1);
pot = ones(n-1,1);
```

#### 3.3.2 Primeira iteração e loop interno

A primeira iteração faz o cálculo inicial do vetor adimensional da tensão. Para isso, é preciso fazer o cálculo do vetor F, que resulta da diferença entre a densidade de lacunas e elétrons em cada intervalo do semicondutor orgânico.

Feitos estes cálculos, aplica-se a condição de fronteira para a Equação de Poisson de uma dimensão, em que somente o primeiro elemento de F sofre alteração, e em seguida resolve-se a equação a fim de descobrir o potencial ao longo do eixo z do semicondutor.

Para determinar a equação do potencial de superfície, foi analisado o ponto de fronteira entre o dielétrico e o semicondutor. Nesse ponto, onde  $E_s$  e  $E_d$  são os campos elétricos no semicondutor e no dielétrico, respectivamente,  $\epsilon_s$  corresponde à permissividade elétrica do P3HT igual a 3 e  $\epsilon_d$ é a permissividade elétrica do dielétrico (neste trabalho o dióxido de silício (SiO<sub>2</sub>) foi utilizado como material isolante), cujo valor é 3,9, é possível fazer a seguinte assertiva:

$$E_s(0)\epsilon_s = E_d(0)\epsilon_d \tag{3.15}$$

Avalia-se que o campo elétrico se equivale ao oposto da derivada do potencial em relação ao eixo de comprimento e que o campo elétrico no isolante corresponde a uma diferença entre os potenciais em dois pontos discretos do dielétrico em relação a uma certa distância. Nesse caso, serão consideradas apenas as duas extremidades do isolante, cujas tensões são iguais a  $V_{gs}$  e  $V_s$ , respectivamente, e separadas por um comprimento d.

$$-\frac{d\psi}{dz}|_{0}\epsilon_{s} = \frac{V_{gs} - V_{s}}{d}\epsilon_{d}$$
(3.16)

Substituindo a derivada pela diferença  $\frac{\psi_0 - \psi_1}{a}$ , no qual  $\psi_0 - \psi_1$  é a subtração de dois potenciais eletrostáticos no semicondutor,  $\psi_0$  é igual a tensão na interface do semicondutor com o dielétrico,  $\varphi_1$  é a tensão no primeiro ponto do semicondutor e *a* é a distância entre esses pontos, além de realizar ajustes matemáticos, alcança-se à seguinte definição:

$$V_s = \frac{V_{gs}}{\frac{\epsilon_s d}{\epsilon_d a} + 1} + \frac{\psi_1}{\frac{\epsilon_d a}{\epsilon_s d} + 1}$$
(3.17)

Para uma questão de inicialização, os vetores de lacunas e elétrons são formados por uma sequência de "uns". Além disso, os pré-cálculos da condição de fronteira e do vetor de potencial eletrostático sob efeito da Equação de Poisson são realizados, como mostrado abaixo:

```
% Initial iteration
for i = 1:n-1
    nz(i) = 1; % niOSC scale
    pz(i) = 1; % niOSC scale
    % Carrier concentration over the semiconductor
    F(i) = pz(i) - nz(i);
    % Interval of the semiconductor
    xx(i) = i;
end;
% Boundary condition calculation
F(1) = F(1) + Vs/phi0;
% Poisson equation
X = inv(A) *F;
```

Após a inicialização, o algoritmo entra em seu loop mais interno, responsável por atualizar o valor do potencial de superfície da Equação de Poisson, fazendo as devidas alterações em Vs até que convirja.

Como mostrado no código abaixo, o valor da condição limiar é afetado pela tensão na interface dielétrico-semicondutor, e consequentemente, pela tensão na porta do transistor. Na seção 3.2.2 a condição limiar  $\varphi(0) = V_s$  era baseada em uma tensão de superfície do semicondutor inserida como parâmetro constante de entrada do algoritmo, para efeitos de teste.

Entretanto, essa tensão leva um certo tempo para se estabilizar a partir do potencial na porta, graças ao movimento das cargas livres que não é instantâneo. Por esta razão, realiza-se também o damping, que é simplesmente um recurso do algoritmo para que seja mais possível alcançar a convergência de  $V_s$  e portanto, a estabilidade do sistema. A condição de saída do loop interno também deve ser bastante restrita, e por essa razão, foi escolhido um valor de  $2,5 \times 10^{-4}$ .

Como pode ser visto no código, a tensão na porta foi inicializada com o valor de  $10^{-3}$  V em vez de zero. Isso ocorreu porque  $V_s$  está no denominador no cálculo do desvio para alcançar a convergência desse valor.

```
% Exit condition
% Inner loop (Stricter exit condition)
            while error > 0.00025
                % Register of former value of Vs
                FormerVs = Vs;
                % Carrier concentration over the semiconductor
                F = pz - nz;
                % Surface voltage calculation
                Vs = Vgs/(1 + (Es*d)/(Ed*a)) + X(1)*phi0/((Ed*a)/(Es*d) + 1);
                % Damping in order to achieve convergence
                Vs = 0.2*Vs+0.8*FormerVs;
                % New boundary condition
                F(1) = F(1) + Vs/phi0;
                % Solution of Poisson's Equation
                X = inv(A) *F;
                % Deviation
                error = abs((Vs - FormerVs)/Vs);
            end;
```

## 3.3.3 Segundo e terceiro loops

Como relatado anteriormente, foram desenvolvidos dois códigos parecidos do algoritmo, em que um opera com tensões positivas e o outro com negativas. A diferença dos dois é a ordem do segundo e do terceiro loop, no qual o código com tensões positivas possui o loop intermediário relacionado ao cálculo da densidade de elétrons, enquanto que o mais externo faz o cálculo da densidade de lacunas. Isso acontece porque os loops mais internos são os que têm que ser executados mais vezes, ou seja, têm que ter maior precisão. Além disso, como foi dito na sub-seção passada, a condição de saída nos loops internos devem ser mais restrita. A ordem dos loops se inverte quando são usadas tensões negativas, conforme está exemplificado nos pedaços de código desta subseção.

A solução da Equação de Poisson calculada acima é usada na determinação da densidade de lacunas do sistema, como mostra a equação abaixo, derivada da corrente limitada pelas armadilhas, em que  $P_T$  se refere à concentração de armadilhas de lacunas. O cálculo de  $\tilde{p}_z$  pode ser separado em dois, em que a primeira parte da soma corresponde à densidade de portadores livres com carga positiva e a segunda parte tem relação com a densidade de armadilhas de lacunas. Relembrando, o "til"foi usado porque esse cálculo é puramente numérico, sem grandezas físicas. Nesse cálculo entra o fator de temperatura lrecaptulado na seção 3.3.1.

$$\tilde{p}_z = e^{\frac{-\varphi\varphi_0}{V_t}} \left( 1 + \frac{P_T}{n_i^{OSC}} e^{-\frac{qE_G}{2lV_t}} e^{\frac{l-1}{l}\frac{\varphi\varphi_0}{V_t}} \right)$$
(3.18)

Ao estender o cálculo para todos os elementos do vetor de densidade de lacunas, é possível calcular a variável de condição de saída, cuja função é permitir a convergência dos valores do vetor. Como este loop é exterior ao do cálculo da Equação de Poisson, a variável erro foi reajustada para 1 com a intenção de que o valor do potencial seja corrigido devido às alterações.

```
% Exit condition
while errorpz > 0.00025
        % Register of former value of pz
        Formerpz = pz;
        .
       % Holes density calculation for each point
            for i = 1:n-1
                % Free holes
                pf(i) = exp(-X(i)*phi0/Vt);
                % Hole traps
                ptrap(i) = (Pt/niOSC)*(exp(-Eg/(2*lp*Vt))*(exp((X(i)*phiO/Vt)*((lp-1)/lp))));
                % Sum of both charges and damping
                pz(i) = pf(i) + ptrap(i);
                pz(i) = 0.2*pz(i) + 0.8*Formerpz(i);
            end;
            % Deviation
            errorpz = max(abs((pz - Formerpz)./pz));
            error = 1;
```

O loop externo segue o mesmo padrão do segundo loop, uma vez que nessa etapa é feito o cálculo da densidade de elétrons, em que  $N_T$  representa a densidade de armadilhas de elétrons, de acordo com a equação (3.19). Novamente a equação de densidade de portadores de cargas divide-se em cargas móveis e cargas não-móveis.

$$\tilde{n}_z = e^{\frac{\varphi\varphi_0}{V_t}} \left( 1 + \frac{N_T}{n_i^{OSC}} e^{-\frac{qE_G}{2lV_t}} e^{\frac{1-l}{l}\frac{\varphi\varphi_0}{V_t}} \right)$$
(3.19)

Igual foi feito anteriormente, encontra-se o valor erronz para convergir o valor de  $\tilde{n_z}$  e reajustam-se as variáveis de condição de saída dos laços de repetição internos. Também notase que as condições de saída do loop são diferentes. Isso acontece por causa da precisão necessária para calcular a densidade de lacunas no sistema, visto que as cargas que são injetadas no sistema para tensões negativas na porta são lacunas, o que exige que se tenha uma condição de saída mais restrita para alcançar o valor mais preciso possível. O loop mais externo tem uma condição de saída mais suave porque a quantidade de elétrons livres é bastante baixa.

```
% Exit condition
while errornz > 0.001
    % Register of former value of pz
    Formernz = nz;
    .
    % Electrons density calculation for each point
        for j = 1:n-1
            % Free electrons
            nf(j) = exp(X(j)*phi0/Vt);
            % Electron traps
            ntrap(i) = (Nt/niOSC)*(exp(-Eg/(2*ln*Vt))*(exp((X(j)*phi0/Vt)*((1-ln)/ln))));
            % Sum of both charges and damping
            nz(j) = nf(i) + ntrap(i);
            nz(j) = 0.2*nz(j) + 0.8*Formernz(j);
        end;
        % Deviation
        errornz = max(abs((nz - Formernz)./nz));
        errorpz = 1;
        error = 1;
```

Como os elementos pertencentes ao segundo e ao terceiro loop são independentes entre si, os dois pedaços de código poderiam facilmente ser fundidos em um só. O fluxograma da figura 3.3 explica como funcionaria o algoritmo com apenas um loop, enquanto que para o código descrito nesta seção, que contém três laços de repetição, extrai-se o fluxograma da figura 3.4.



Figura 3.3: Fluxograma para algoritmo com apenas um loop



Figura 3.4: Fluxograma para algoritmo com três loops

O algoritmo modularizado em três laços de repetição é mais eficiente do que o algoritmo de um laço, pois ao ter somente um laço para os cálculos da tensão de superfície e da densidade de portadores móveis e não-móveis, as variáveis não possuem tempo suficiente para convergir, visto que o sistema irá corrigir uma variável e ao mesmo instante irá defasar outra que estava a caminho de convergir.

# 3.3.4 Passo final

No último passo os cálculos anteriores são refeitos para garantir o pleno funcionamento da simulação. Além disso, no final é feita a operação para determinar a densidade de portadores móveis ao longo do canal. Todo o algoritmo está envolvido por um loop que controla a tensão na porta, para que os cálculos sejam efetuados para diversos valores de tensão. O valor de saída do loop considerado aqui é de -12 V, o que significa que o cálculo de todo o algoritmo estará baseado

em tensões de porta de 0 V a -12 V.

Para fazer isso, é preciso que para cada intervalo amostrado no semicondutor, sejam subtraídas as densidades de lacunas e de elétrons, como determinado na equação (2.21). É importante recordar que os valores dessas densidades estão diretamente relacionados ao potencial da porta, e por consequência, a concentração de portadores também está. As equações 3.20 e 3.21 mostram como esse cálculo pode ser feito.

$$\tilde{Q}_z = \tilde{p}_F - \tilde{n}_F \tag{3.20}$$

Em que  $\tilde{p_F} = e^{\frac{-\varphi\varphi_0}{V_t}}$  e  $\tilde{n_F} = e^{\frac{\varphi\varphi_0}{V_t}}$ . Assim, a densidade de portadores livres é definida por:

$$Q = \int \tilde{Q_z} dz \tag{3.21}$$

Para este fim, foi usada a função trapz do MATLAB, que apura a integração por meio da área formada por debaixo dos pontos do vetor qx.

```
% Here you can vary the gate voltage (V)
while Vgs > -12
    .
    .
% Final step
    % Recalculation of holes and electrons density
    for i = 1:n-1
       pz(i) = exp(-X(i)*phi0/Vt)*(1 + (Pt/niOSC)*(exp(-Eg/(2*lp*Vt))*(exp((X(i)*phi0/Vt)*((lp-1)
        nz(i) = exp(X(i)*phi0/Vt)*(1 + (Nt/niOSC)*(exp(-Eg/(2*ln*Vt))*(exp((X(i)*phi0/Vt)*((1-ln)/
       F(i) = pz(i) - nz(i);
    end;
    % Boundary condition and Poisson's Equation
    Vs = Vgs/(1 + (Es*d)/(Ed*a)) + X(1)*phi0/((Ed*a)/(Es*d) + 1);
    F(1) = F(1) + Vs/phi0;
    X = inv(A) * F;
    % Damping
    Formerpz = pz;
    Formernz = nz;
    FormerVs = Vs;
    % Last iteration
    for i = 1:n-1
       pz(i) = exp(-X(i)*phi0/Vt)*(1 + (Pt/niOSC)*(exp(-Eg/(2*lp*Vt))*(exp((X(i)*phi0/Vt)*((lp-1)
        nz(i) = exp(X(i)*phi0/Vt)*(1 + (Nt/niOSC)*(exp(-Eg/(2*ln*Vt))*(exp((X(i)*phi0/Vt)*((1-ln)/
    end;
    Vs = Vgs/(1 + (Es*d)/(Ed*a)) + X(1)*phi0/((Ed*a)/(Es*d) + 1);
    % Display current point
```

```
display(k);
%Mobile Charge Carrier Concentration
% Length over z axis
z = 0:L/(n-2):L;
% Free carrier concentration
qz = pf - nf;
% Total carrier concentration
qz = pz - nz;
% Integral over semiconductor length
q(k) = trapz(z,qz);
.
% Gate voltage increment, in order to repeat the calculation for a new
% Vgs
Vgs = Vgs - 0.1;
% Surface voltage
pot(k) = X(1);
% Next point of simulation
k = k + 1;
```

#### end;

Uma vez que a densidade de portadores livres é determinada, é oportuno estimar a capacitância do óxido no transistor e a tensão de limiar que o dispositivo trabalha. Para isso, é criado um gráfico em que a concentração seja dependente da tensão da porta e assim, usando recursos de regressão linear e não-linear.

# Capítulo 4

# Resultados da Simulação e Discussões

# 4.1 Introdução

A partir das teorias empregadas na Revisão Bibliográfica e dos códigos em linguagem MATLAB apresentados no Desenvolvimento, foi gerada uma série de resultados em forma de gráficos e tabelas nas simulações.

Em primeiro lugar, serão exibidos os perfis de densidade de elétrons e lacunas em função da tensão na porta do transistor, considerando apenas cargas móveis. Em posse desses perfis, então se define a concentração de cargas para diferentes tensões na porta. Feito isso, a mobilidade do material orgânico é determinada e em seguida definem-se as características de transferência e de saída. Em seguida, os cálculos serão refeitos relevando a presença das armadilhas no sistema, para apontar quais são os efeitos e as discrepâncias entre o caso de ter apenas cargas livres. Por último, são feitos um estudo a partir de um material orgânico específico e breves discussões sobre mobilidade e distribuição exponencial das energias das armadilhas.

# 4.2 Perfis de densidade e concentração de portadores a partir da tensão na porta

## 4.2.1 Densidade de elétrons e lacunas

Haja vista que a partir das equações 3.18 e 3.19 é possível calcular aproximadamente a densidade de elétrons e lacunas por toda a extensão do semicondutor, foram assim gerados quatro gráficos que retratam como essas cargas móveis se comportam quando são atraídas ou repelidas por diversas tensões na porta. Cada curva neste gráfico corresponde a uma tensão na porta diferente, com intervalos de 0,5 V, em um semicondutor de comprimento igual a 40 nm. Neste experimento computacional foram consideradas tensões negativas e positivas na porta do transistor. Vale salientar que para este experimento não foi inserido nenhum tipo de armadilha.



Figura 4.1: Gráfico da quantidade de lacunas para diferentes tensões negativas na porta em cada posição do semicondutor



Figura 4.2: Gráfico da quantidade de elétrons para diferentes tensões negativas na porta em cada posição do semicondutor



Figura 4.3: Gráfico da quantidade de lacunas para diferentes tensões positivas na porta em cada posição do semicondutor



Figura 4.4: Gráfico da quantidade de elétrons para diferentes tensões positivas na porta em cada posição do semicondutor

O gráfico da figura 4.1 exalta como a quantidade de lacunas na interface é muito superior do que no final do substrato. Ao aplicar uma tensão negativa na porta, as lacunas do semicondutor são atraídas fortemente para a superfície. É importante observar também que ao decrementar mais a tensão na porta, mais lacunas são atraídas para a interface com o dielétrico. O inverso se aplica ao gráfico da figura 4.2, em que a ação repelente dos elétrons às tensões negativas faz com que o lado direito correspondente ao final do substrato fique repleto de elétrons à medida que a tensão da porta é reduzida.

Entretanto, ao observar as imagens 4.3 e 4.4, percebe-se que o fenômeno muda, devido à aplicação de tensões positivas na porta do transistor. Enquanto que ao se utilizar tensões negativas as lacunas ficaram mais perto da interface com a região isolante, na situação atual os elétrons que são atraídos em quantidade bem mais significativa para o início do semicondutor.

É interessante ver como a densidade nas figuras 4.1 e 4.4 são enormes, em que para tensões  $V_{gs}$  maiores, a diferença entre lacunas e elétrons livres é de aproximadamente  $10^{17} cm^{-3}$ . Além disso, a grande quantidade de portadores livres se concentra na região de até 2nm, ou seja, pode-se inferir que o canal fonte-dreno tem aproximadamente essa espessura.

#### 4.2.2 Densidade de portadores livres

Tendo em posse os gráficos das densidades de lacunas e elétrons, é possível calcular a concentração de portadores de cargas livres para diferentes tensões na porta ao longo de todo o semicondutor, como prescreveram as equações 3.20 e 3.21. As figuras 4.5 e 4.6 relatam como a concentração de elétrons e lacunas varia: caso a tensão da porta tenha valores de maior magnitude, a densidade de cargas livres aumenta.



Figura 4.5: Gráfico da densidade de cargas para diferentes tensões negativas na porta



Figura 4.6: Gráfico da densidade de cargas para diferentes tensões positivas na porta

Para baixas tensões negativas e positivas, a densidade é aproximadamente nula, pois não há elétrons ou lacunas suficientes perto da interface, não possibilitando a criação de um canal entre fonte e dreno para que haja fluxo de corrente. O valor onde ocorre uma transição de uma concentração próxima a zero para concentrações significativas nas figuras 4.5 e 4.6 equivale à tensão de limiar, ou seja, a tensão com que a densidade de portadores livres não é mais quase zero e que ganha estabilidade é chamada de  $V_{TH}$ .

Serão propostas duas estratégias para explicar o comportamento dos gráficos 4.5 e 4.6, que possam definir a concentração dos portadores livres e a tensão de limiar. As duas estratégias consistem em reportar apenas a parte dos gráficos onde há um comportamento linear, que corresponde às tensões na porta superiores à  $V_{TH}$ .

No primeiro método, para determinar com exatidão os valores de  $V_{TH}$  é preciso utilizar do recurso de regressão *cftool* do MATLAB. Tendo em posse os pontos gerados na simulação para a densidade de cargas livres e tensão na porta e excluindo os valores extremos que não fazem parte da aproximação linear, é possível extrair uma expressão que descreva o comportamento desses gráficos. Essa equação tem o formato f(x) = mx + b, em que *m* corresponde à inclinação da curva dada pela razão entre a variação da densidade e a variação da tensão na porta. Assim:

$$Q = C_{fit} \times (V_{gs} - V_{TH}) \tag{4.1}$$

Como o quociente da concentração de cargas livres pela diferença de potencial na porta é igual à capacitância do óxido, é conveniente aplicar o mesmo para a equação que foi extraída, no qual a capacitância por área  $C_{fit}$  equivale ao coeficiente m. Quando o valor teórico da densidade é zero, a tensão da porta referente a este ponto dividida por  $C_{fit}$  é simplesmente a tensão de limiar, dado pelo valor de  $-\frac{b}{m}$ .



Figura 4.7: Esquemático da primeira estratégia para definir o comportamento da densidade de portadores livres

Na figura 4.8 se demonstra como o *fitting* linear foi realizado, bem como as equações que representam cada gráfico, para tensões na porta de -12 a 12 V. A partir destas equações, é possível extrair os parâmetros  $C_{fit}$  e  $V_{TH}$ .



Figura 4.8: Gráficos das regressões lineares efetuadas para tensões negativas e positivas, de -12 a 12 V

$$C_{fit} = -8,51 \times 10^{-8} F/cm^2 \quad V_{TH} = -1,12 \text{ V} \qquad C_{fit} = 8,52 \times 10^{-8} F/cm^2 \quad V_{TH} = 1,12 \text{ V}$$

A equação (4.2) é usada para calcular a capacitância real do óxido, usando como parâmetros a permissividade do material isolante e a espessura desta camada. Levando em conta que a espessura da região é de 30 nm e o material dielétrico é o dióxido de silício (SiO<sub>2</sub>), cuja permissividade relativa é igual a 3,9, a capacitância pode ser calculada abaixo:

$$C_{ox} = \frac{\epsilon_d \epsilon_0}{d} = 1,15 \times 10^{-7} F/cm^2$$
(4.2)

Ao comparar com o resultado do *fitting*, pode-se inferir que o resultado de  $C_{fit}$  obtido na simulação condiz com o valor esperado, visto que há pouca diferença entre os dois. Estendendo a tensão da porta para tensões de -40 V a 40 V, são gerados os seguintes gráficos:



Figura 4.9: Gráficos das regressões lineares efetuadas para tensões negativas e positivas, de -40 a 40 V

 $C_{fit} = -6,97 \times 10^{-8} F/cm^2$   $V_{TH} = 0,728$  V  $C_{fit} = 6,97 \times 10^{-8} F/cm^2$   $V_{TH} = -0,703$  V Contudo, ao analisar os gráficos e as equações da figura 4.9, verifica-se que apesar dos valores de  $C_{fit}$  ainda serem consistentes, os valores de  $V_{TH}$  são diferentes aos observados na figura 4.8, pois para tensões negativas na porta, por exemplo, a tensão de limiar é positiva. Além disso, percebe-se que os pontos da simulação não são exatamente lineares, pois as extremidades não obedecem a reta da regressão linear.

O que se pode concluir a partir disso é que para pequenas tensões na porta a estratégia linear funciona bem, no entanto, para maiores tensões, a tensão de limiar não tem mais um sentido físico, servindo apenas como um parâmetro da regressão. A tensão de limiar separa os comportamentos exponencial e potencial em um gráfico de densidade de cargas livres, como mostrado em 4.5 e 4.6.

Por esse motivo, é proposto agora uma nova estratégia de *fitting* usando regressão de potência, cuja equação genérica é do formato  $f(x) = a \times x^b$ , em que *a* representa a capacitância  $C_{pot}$  e o expoente *b* é a inclinação da curva. O valor de *a* tem unidade  $\left[\frac{C}{cm^2V^b}\right]$ . É importante ressaltar também que na variável *x* deve-se considerar que a tensão de limitar já foi subtraída, ou seja, corresponde a uma tensão efetiva. Portanto:

$$Q = C_{pot} \times V_{eff}^{b}, \text{em que } V_{eff} = V_{gs} - V_{TH}$$

$$(4.3)$$

Para descobrir os valores reais dos parâmetros, deve-se aplicar o recurso do logaritmo nos dois lados da equação:

$$\log Q = \log C_{pot} + b \times \log V_{eff} \tag{4.4}$$

Para encontrar o valor de  $V_{TH}$ , deve-se utilizar o gráfico em escala log-log de  $C_{pot}$  por  $V_{gs}$ , em que de acordo com a equação (4.3), o valor da tensão na porta é subtraído por um certo  $V_{TH}$  até que o gráfico tenha uma aparência linear. Tendo em posse o valor da tensão de limiar, o comando *cftool* pode ser usado novamente para determinar os parâmetros  $C_{pot}$  e b.



Figura 4.10: Esquemático da segunda estratégia para definir o comportamento da densidade de portadores livres

Para valores de tensão na porta até -40 ou 40 V, foram gerados os seguintes gráficos em escala loglog representando os pontos da simulação e a regressão de potência. A tensão de limiar foi ajustada para que os pontos em escala loglog se comportassem de maneira ao formar uma reta. O valor encontrado para as duas retas foi de -1,5 V e 1,5 V.



Figura 4.11: Gráficos das regressões não-lineares efetuadas para tensões negativas e positivas, de -40 a 40 V

$$C_{pot} = -1,12 \times 10^{-7} F/cm^2$$
  $V_{TH} = -1,5$  V  $C_{pot} = 1,10 \times 10^{-7} F/cm^2$   $V_{TH} = 1,5$  V

É perceptível que a regressão de potência é muito mais fiel aos resultados da simulação do que a regressão linear, como foi ilustrado na figura 4.9. Ao comparar os parâmetros encontrados com os calculados, a capacitância do óxido calculada em (4.2) é bem similar a  $C_{pot}$ . A tensão de limiar  $V_{TH}$  também atingiu um valor aceitável, no entanto, como esse valor foi extraído manualmente do gráfico loglog, não se pode afirmar que é bastante coeso com a realidade.

## 4.2.3 Potencial de superfície

O potencial de superfície no semicondutor pode ser calculado para diversas tensões na porta, como descrito na figura 4.12. A superfície do semicondutor corresponde ao primeiro ponto da simulação, ou seja, o potencial de superfície refere-se a  $\varphi(0)$  e portanto  $\varphi(0) = V_s$ . O potencial de superfície é a queda de tensão vinda da porta causada pela contribuição de todo o semicondutor desde a interface até o corpo do substrato.

Desse modo, como mostra a figura 4.6, para pequenas tensões na porta, a densidade de portadores na superfície é muito baixa, o que faz com que o potencial de superfície varie drasticamente conforme  $V_{gs}$  aumenta.

No entanto, para tensões maiores na porta, a maior concentração de cargas injetadas na porta faz com que se tenha a mesma concentração na interface. Em virtude disso, o potencial que decai no óxido cresce linearmente quando  $V_{gs}$  aumenta, o que acarreta num comportamento constante do potencial de superfície. Isso pode ser explicado pela relação (4.5), em que a densidade de cargas total abaixo do óxido é dependente da tensão de superfície  $V_s$ 

$$V_{gs} = \frac{c_{tot}(V_s)}{C_{ox}} + V_s \tag{4.5}$$

Figura 4.12: Gráfico do potencial na interface para diferentes tensões positivas na porta

20

Tensão na porta (V)

25

30

35

40

15

# 4.3 Extração da mobilidade

1.2

Potencial de superfície (V)

0.2

0' 0

5

10

Para obter o valor da mobilidade de um semicondutor, é possível utilizar a Lei de Mott-Gurney da equação (2.6), no regime de corrente limitada pela carga espacial (SCLC). Levando em consideração para estas discussões o polímero P3HT (poli(3-hexiltiofeno-2,5-dil)), o valor fixo de permissividade elétrica é igual a 3,9.

Segundo Goh *et al.* (2005), ao se multiplicar o peso molecular<sup>2</sup> do material em 10, a mobilidade pode crescer em até  $10^4$  vezes. Ao se ter três pesos moleculares diferentes, existem três estruturas microcristalinas de P3HT diferentes. Por esta razão, foram escolhidos três pesos moleculares médios para simularem situações de baixo, médio e alto peso molecular, a fim de gerar três mobilidades diferentes.

Para cada um dos três pesos moleculares, também foram usados duas espessuras de semicondutor diferentes, com o fim de provar que a mobilidade é a mesma ou pelo menos similar nos dois casos. Os valores usados na extração da mobilidade também foram extraídos do trabalho de Goh et al. (2005).

 $<sup>^2 {\</sup>rm Também}$  conhecido como massa molar, é a massa de um mol de moléculas em gramas/mol

Os gráficos de característica de transferência a seguir foram gerados a partir destes dados, no qual os pontos se referem às amostras efetuadas e as curvas correspondem às regressões polinomiais executadas. Nos gráficos 4.13, I.1 e I.3 as amostras foram realizadas usando a raiz quadrada da corrente em função da tensão aplicada, no qual se aplicou a regressão linear. Os gráficos 4.14, I.2 e I.4 representam amostras reais da corrente pela tensão aplicada, modeladas por regressão não-linear.

No primeiro experimento, ao fazer a regressão linear e considerando a equação genérica y(x) = mx + c, o coeficiente c acabou sendo quase igual a zero, restando portanto apenas o coeficiente m. A partir deste coeficiente e tomando o gráfico 4.13 como referência, é possível substituir na expressão de corrente limitada por carga espacial na equação (2.29), para obter as mobilidades para as curvas de comprimento igual a 140 nm e 221 nm, respectivamente:  $\mu_{140} = 3,01 \times 10^{-4}$  cm<sup>2</sup>V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup> e  $\mu_{221} = 3,21 \times 10^{-4}$  cm<sup>2</sup>V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup>.

A regressão não-linear no segundo caso adquiriu uma forma polinomial de grau 2, de acordo com a seguinte equação genérica:  $y(x) = ax^2 + bx + c$ , em que *b* e *c* são praticamente nulos. Utilizando do coeficiente angular novamente e do gráfico 4.14 na equação (2.29), tem-se as seguintes mobilidades para as curvas de 140 nm e 221 nm:  $\mu_{140} = 3,24 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$  e  $\mu_{221} = 3,58 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ .



Figura 4.13: Gráfico da característica de transferência do P3HT com amostras usando a raiz quadrada da corrente e regressão linear para baixo peso molecular



Figura 4.14: Gráfico da característica de transferência do P3HT com amostras usando regressão não-linear para baixo peso molecular

A tabela 4.1 contém um resumo dos dados coletados em todos os experimentos, incluindo os coeficientes adquiridos nas regressões e as mobilidades calculadas.

Experimento	Comprimento do semicondutor (nm)	Coeficiente linear	$\begin{array}{c} \text{Mobilidade} \\ \text{linear} \\ (\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}) \end{array}$	Coeficiente não-linear	$\begin{array}{c} \text{Mobilidade} \\ \text{não-linear} \\ (\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}) \end{array}$
Exporimente 1	$L_1 = 140$	0,18090	$3,01  imes 10^{-4}$	0,03523	$3,24\times10^{-4}$
Experimento 1	$L_2 = 221$	0,09424	$3,21\times 10^{-4}$	0,00992	$3,58\times10^{-4}$
Europimonto 2	$L_1 = 90$	0,21470	$1,12\times 10^{-4}$	0,04485	$1,09\times 10^{-4}$
Experimento 2	$L_2 = 154$	0,09585	$1,12\times 10^{-4}$	0,00908	$1,11\times 10^{-4}$
Experimente 3	$L_1 = 96$	0,12310	$4,49 \times 10^{-5}$	0,02153	$6,37 \times 10^{-5}$
Experimento 5	$L_2 = 192$	0,03712	$3,26\times 10^{-5}$	0,00199	$4,72\times10^{-5}$

Tabela 4.1: Tabela relacionando o comprimento do semicondutor com sua mobilidade

É perceptível que as curvas de regressão não estão perfeitamente sobre todos os pontos do ex-

perimento. Além disso, nota-se que os valores das mobilidades calculados na tabela para cada um deles também não são estritamente iguais. A explicação para isso é que os dados foram extraídos da fonte de forma manual, estando sujeito a pequenas variações e por esse motivo, causando uma pequena discrepância entre os resultados do trabalho de Goh *et al.* (2005) e os coletados para este experimento.

# 4.4 Características de transferência e saída

As curvas características que definem o transistor em estudo foram criadas a partir das equações (2.14) e (2.17), para modo triodo e saturação respectivamente. Para estas simulações, a mobilidade usada é de  $3,24 \ cm^2 V^{-1} s^{-1}$ , retirada do experimento 1 da seção 4.3, e o parâmetro W/L da divisão entre a largura e o comprimento do filme semicondutor é igual a 100, em regime de ausência de armadilhas. O modelo também não considera como os portadores móveis são injetados no sistema e também ignora o efeito dos metais usados como eletrodos.

Para cada curva de corrente × tensão na porta, o valor da tensão entre fonte e dreno foi parametrizado, a fim de observar o comportamento do transistor quando sujeito a diferentes valores de  $V_{ds}$ . O mesmo foi feito para as características de saída, em que os valores de  $V_{gs}$  foram parametrizados.

Depois de executar a simulação do algoritmo principal, os valores da densidade de portadores livres e as diferentes tensões na porta foram retirados e inseridos na ferramenta *cftool* do MATLAB, com o intuito de fazer uma regressão linear que fornece os parâmetros  $C_{fit}$  (equivalente a  $C_{ox}$  para a simulação) e  $V_{TH}$ . Tendo em posse esses valores,  $C_{ox}$  foi substituído por  $C_{fit}$  nas equações (2.14) e (2.17), gerando assim as seguintes relações de corrente e tensão:

Modo triodo:

$$I_{ds} = -\mu_n \frac{W}{L} C_{fit} [(V_{gs} - V_{TH}) V_{ds} - \frac{V_{ds}^2}{2}]$$
(4.6)

Modo saturação:

$$I_{ds} = -\mu_n \frac{W}{L} C_{fit} \frac{(V_{gs} - V_{TH})^2}{2}$$
(4.7)

#### 4.4.1 Semicondutor do tipo-p

Os parâmetros retirados da regressão linear efetuada para tensões negativas na porta são  $C_{fit} = 8,514 \times 10^{-8} \text{ F}/cm^2 \text{ e } V_{TH} = -1,12 \text{ V}.$ 



Figura 4.15: Gráfico da característica de transferência do transistor para tensões negativas na porta e com  $V_{ds}$  parametrizado

Quando são injetadas apenas lacunas na porta do semicondutor, verifica-se que a curva para uma certa tensão  $V_{ds}$  tem três fases distintas. Primeiramente, a tensão limiar  $V_{TH}$  correspondente ao momento de transição entre o estado de corte ( $V_{gs} = V_{TH}$ ) é igual a -1,12 V. Em seguida, para tensões mais negativas na porta, a corrente segue uma lei quadrática, no qual a sua magnitude aumenta com o quadrado da tensão.



Figura 4.16: Gráfico da característica de saída do transistor para tensões negativas entre o dreno e a fonte e com  $V_{gs}$  parametrizado

A característica de saída de um transistor destaca claramente as três regiões de operação. Para um transistor tipo-p, a região de corte não produz corrente quando  $V_{gs} > -1, 12$  V. Caso  $V_{gs}$  seja menor do que a tensão linear, se a tensão de fonte para dreno escolhida for maior do que a diferença entre  $V_{gs}$  e  $V_{TH}$ , o transistor está em modo triodo, em que há um aumento da resistência do canal devido ao seu estreitamento. Por esta razão, em vez de continuar sendo uma reta, à medida que  $V_{ds}$  aumenta, mais estrangulado fica o canal e consequentemente, mais resistente à corrente ele é. Por fim, quando  $V_{gs} - V_{TH}$  alcança o valor de  $V_{ds}$ , a profundidade do canal se iguala a zero (canal estrangulado) e assim  $V_{ds}$  não influencia mais a forma do canal, o que faz com que a corrente se mantenha constante para qualquer valor de  $V_{ds}$ .

#### 4.4.2 Semicondutor do tipo-n

Os parâmetros retirados da regressão linear efetuada para tensões positivas na porta são  $C_{fit} = 8,516 \times 10^{-8} \text{ F}/cm^2$  e  $V_{TH} = 1,12 \text{ V}.$ 

 $C_{fit} = 8,516 \times 10^{-8} \text{ F}/cm^2 V_{TH} = 1,12 \text{ V}$ 



Figura 4.17: Gráfico da característica de transferência do transistor para tensões positivas na porta e com  $V_{ds}$  parametrizado

Para semicondutores do tipo-n, ao se aplicar uma tensão positiva na porta, os elétrons são atraídos para a interface de forma a surgir um canal entre fonte e dreno. De maneira análoga ao que acontece aos transistores tipo-p, a tensão limiar de 1,12 V é o limite entre a região de corte e a região de condução. Nessa última, para  $V_{gs} > 1,12$  V, a corrente entra em um crescimento quadrático caso  $V_{gs}$  venha a continuar aumentando.



Figura 4.18: Gráfico da característica de saída do transistor para tensões positivas entre o dreno e a fonte e com  $V_{gs}$  parametrizado

Esse gráfico é a forma oposta do gráfico 4.16, pois quando  $V_{gs} \ll V_{TH}$ , não há um número suficiente de elétrons para se acumular na interface com o dielétrico para formar um canal de condução. Caso  $V_{gs} \geq V_{TH}$ , se a diferença entre esses dois valores for maior do que  $V_{ds}$ , o transistor entra em modo triodo e o canal vai adquirindo resistência até chegar ao ponto de estrangulamento. Nesse instante, quando  $V_{gs} - V_{TH}$  iguala  $V_{ds}$ , o transistor entra em modo saturação e a corrente entre fonte e dreno passa a não depender mais de  $V_{ds}$ .

# 4.5 Impacto das armadilhas

Essa parte da discussão trata do efeito da presença de armadilhas nas concentrações de cargas e nas características de transferência e de saída, considerando diversas densidades. Além disso, será avaliado o impacto do fator de temperatura responsável pela distribuição exponencial das energias das armadilhas na concentração de portadores livres.

#### 4.5.1 Variação de densidade das armadilhas

Primeiramente, é importante deixar claro que essa seção trata de uma análise hipotética, em que os valores das densidades de armadilhas de elétrons são variados. Como o número de armadilhas é uma característica intrínseca do material e do processo de fabricação, as quantidades consideradas nos gráficos são fictícias e não representam nenhum material especafico. Para tensões positivas de até 12 V, foi feito o gráfico 4.19 para verificar o impacto do aumento do número de armadilhas na concentração de portadores livres.



Figura 4.19: Gráfico da densidade de cargas livres pela tensão na porta para diferentes densidades de armadilhas de elétrons

À medida que o número de armadilhas na banda proibida aumenta, mais elétrons livres são aprisionados, menor é a densidade de portadores e assim, menor é a corrente entre os dois contatos paralelos do semicondutor. Nas regiões em que  $V_{gs} < V_{TH}$ , a concentração de portadores é baixa de forma a não se ter um canal definido entre fonte e dreno. Quando  $V_{gs}$  é maior, há uma saturação no canal que faz com que a o número de portadores livres se estabilize e que a corrente seja constante, como será abordado adiante.

A mesma análise pode ser feita para tensões negativas na porta, em que as lacunas livres são os portadores de cargas.



Figura 4.20: Gráfico da densidade de cargas livres pela tensão na porta para diferentes densidades de armadilhas de lacunas

Os dois próximos gráficos correspondem à densidade de todas as cargas presentes no semicondutor, sejam elas livres ou armadilhadas. Espera-se que a variação na densidade de armadilhas não afete a concentração de cargas totais, pois aqui não faz diferença se uma carga livre foi capturada por um armadilha ou não.



Figura 4.21: Gráfico da densidade das cargas pela tensão na porta para diferentes densidades de armadilhas de elétrons



Figura 4.22: Gráfico da densidade das cargas pela tensão na porta para diferentes densidades de armadilhas de lacunas

Para verificar o impacto das armadilhas nas características de transferência e de saída do

transistor, é preciso utilizar novamente das equações (4.6) e (4.7) que definem a curva corrente × tensão para modo triodo e saturação. Para isso, será feito uso da primeira estratégia de definição da curva de densidade de cargas livres em função da tensão da porta, fazendo uma aproximação linear da região onde o número de cargas livres se estabiliza.

A tabela 4.2 mostra os fatores  $C_{fit}$  e  $V_{TH}$  extraídos da regressão linear para diversas densidades de armadilhas. Para tensões na porta abaixo de zero, foi considerada uma concentração de elétrons  $N_t$  nula, enquanto que para tensões maiores ou igual a zero, a densidade de lacunas  $P_t$  era igual a zero.

Tonção no	Densidade de		
remsao na $(V)$	armadilhas	$C_{fit} \ (F/cm^2)$	$V_{TH}$ $(V)$
porta (v)	$(cm^{-3})$		
	$P_t = 0$	$8,51\times10^{-8}$	-1,12
	$P_t = 10^{17}$	$-8,51 \times 10^{-8}$	-1,12
$V_g < 0$	$P_t = 10^{20}$	$-4,65 \times 10^{-8}$	-1,09
	$P_t = 10^{21}$	$-9,14 \times 10^{-9}$	-1,02
	$P_t = 10^{22}$	$-1,01 \times 10^{-9}$	-0,920
	$P_t = 10^{23}$	$-1,02 \times 10^{-10}$	-0,818
	$N_t = 0$	$8,51\times 10^{-8}$	$1,\!12$
	$N_t = 10^{17}$	$8,51\times 10^{-8}$	1,12
$V_g >= 0$	$N_t = 10^{20}$	$4,65\times 10^{-8}$	1,08
	$N_t = 10^{21}$	$9,15 \times 10^{-9}$	1,03
	$N_t = 10^{22}$	$1,01 \times 10^{-9}$	0,918
	$N_t = 10^{23}$	$1,03 \times 10^{-10}$	0,826

Tabela 4.2: Tabela contendo os parâmetros  $C_{fit} \in V_{TH}$  retirados a partir da tensão na porta e da densidade de armadilhas no semicondutor

A figura 4.23 revela o decaimento da corrente  $I_{ds}$  à medida que a densidade de armadilhas cresce. A tensão  $V_{ds}$  utilizada foi de 5 V, a mobilidade é igual a 3,24  $cm^2V^{-1}s^{-1}$  e a razão  $\frac{W}{L}$  considerada é igual a 100. Verifica-se que para uma densidade baixa de  $10^{17}cm^{-3}$  e tensões  $V_{gs}$  altas, a corrente é na ordem de 40 vezes maior do que em uma concentração de  $10^{22}cm^{-3}$ , por exemplo.



Figura 4.23: Gráfico da característica de transferência do transistor para tensões positivas na porta com  $V_{gs} = 5$  V e variando a densidade de armadilhas de elétrons

Finalmente, para uma tensão  $V_{gs}$  igual a 5 V, a característica de saída deixa bem claro quais são as regiões de triodo e de saturação. Além disso, pode-se comparar o aumento da densidade de armadilhas com uma diminuição na tensão na porta, pois o mesmo comportamento é observado na figura 4.18.



Figura 4.24: Gráfico da característica de saída do transistor para tensões positivas entre o dreno e a porta com  $V_{gs} = 5$  V e variando a densidade de armadilhas de elétrons

#### 4.5.2 Variação de distribuição exponencial na banda proibida das armadilhas

Nesta sub-seção será feito o estudo da variação do fator l introduzido na seção 2.3.2. Recapitulando,  $l = \frac{T_c}{T}$ , em que T representa a temperatura ambiente e  $T_c$  é a temperatura característica da distribuição exponencial das energias das armadilhas pela banda proibida. Esse último fator é diretamente relacionado à energia característica da armadilha. Como podem existir armadilhas de elétrons e de lacunas, o fator l também deve ser adaptado para esses dois tipos de portadores, representados por  $l_p$  e  $l_n$ .

Esta análise será feita apenas para quando se injetam elétrons, portanto, só será necessário usar  $l_n$ . Diferentemente das seções anteriores, quando a razão das duas temperaturas era igual a 1, será considerado um fator  $l_n$  maior, para avaliar quais são os efeitos das energias que caracterizam a distribuição exponencial. Para isso,  $N_t$  foi fixado em  $10^{21} cm^{-3}$ ,  $P_t = 0$  e apenas o valor de  $l_n$  foi variado. A figura 4.25 mostra como a densidade de portadores livres foi afetada para diferentes  $l_n$  sob várias tensões positivas na porta.



Figura 4.25: Gráfico da densidade de cargas para diferentes tensões positivas na porta variando o fator  $l_n \in N_T = 10^{21} cm^{-3}$ .

É evidente como a mudança do fator  $l_n$  e consequentemente da distribuição exponencial das energias das armadilhas pela banda proibida afetam a concentração de cargas livres. Quanto maior é  $l_n$ , maior é o decaimento da distribuição exponencial por diferentes níveis de energia e portanto, mais elétrons são aprisionados.

Uma vez que as novas curvas de densidade não são mais similares a uma reta em escala normal, a equação (4.1) não pode mais representá-las. Ao usar a segunda estratégia, em que a tensão da porta segue uma lei de potência, as aproximações dos resultados se tornam mais condizentes, para diferentes valores de  $l_n$ . As figuras 4.26, 4.27 e 4.28 demonstram como as regressões de potência foram realizadas, bem como as equações que as definem. Por fim, a tabela 4.3 contém os diferentes parâmetros da regressão para diferentes densidades de armadilhas e diversos fatores de temperatura para armadilhas de elétrons.



Figura 4.26: Gráfico da densidade de cargas para  $V_{gs} - V_{TH}$  juntamente com a regressão de potência, para  $l_n = 1$  e  $N_T = 10^{21} cm^{-3}$ .

$$V_{TH} = 1.5 \text{ V}$$
  $Q(V_{qs}) = 1.281 \times 10^{-8} (V_{qs} - 1.5)^{0.8637}$ 



Figura 4.27: Gráfico da densidade de cargas para  $V_{gs} - V_{TH}$  juntamente com a regressão de potência, para  $l_n = 1,5$  e  $N_T = 10^{21} cm^{-3}$ .
$V_{TH} = 1.5 \text{ V}$   $Q(V_{gs}) = 7,278 \times 10^{-10} (V_{gs} - 1,5)^{1.617}$ 



Figura 4.28: Gráfico da densidade de cargas para  $V_{gs} - V_{TH}$  juntamente com a regressão de potência, para  $l_n = 2$  e  $N_T = 10^{21} cm^{-3}$ .

Fator de	Densidade de			
temperatura	armadilhas	$C_{pot}$	$V_{TH}$ (V)	Expoente b
$L_n$	$(cm^{-3})$			
	$N_t = 0$	$1,10 \times 10^{-7}$	1,5	0,886
1	$N_t = 10^{17}$	$1,09 \times 10^{-7}$	1,5	0,891
	$N_t = 10^{21}$	$1,28\times10^{-8}$	1,5	0,864
1,5	$N_t = 0$	$1,10 \times 10^{-7}$	1,5	0,886
	$N_t = 10^{17}$	$1,09 \times 10^{-7}$	1,5	0,891
	$N_t = 10^{21}$	$7,28 \times 10^{-10}$	1,5	1,62
	$N_t = 0$	$1,10 \times 10^{-7}$	1,5	0,886
2	$N_t = 10^{17}$	$1,09 \times 10^{-7}$	1,5	0,891
	$N_t = 10^{21}$	$5,34 \times 10^{-11}$	1,5	2,31

$$V_{TH} = 1.5 \text{ V}$$
  $Q(V_{gs}) = 5.341 \times 10^{-11} (V_{gs} - 1.5)^{2.312}$ 

Tabela 4.3: Tabela comparando os parâmetros da regressão de potência para diferentes densidades de armadilhas e diferentes fatores de temperatura

### 4.6 Simulação com P3HT

Como já foi introduzido na seção 3.3.1, o P3HT (Poli-3-hexiltiofeno) é um polímero que vem sendo bastante estudado com o intuito de ser um semicondutor orgânico aplicado em diversos dispositivos eletrônicos. Ele se destaca por ter fácil processamento, ter boa estabilidade e ser um dos polímeros semicondutores comercializáveis com maior mobilidade.[22]

O P3HT, como a maioria dos materiais orgânicos usados na fabricação de transistores, é conhecido por ser um semicondutor do tipo-p, em que a condução de cargas é feita por lacunas. No entanto, dependendo da dopagem realizada e do material usado nos eletrodos, o polímero pode adquirir característica ambipolar, ou seja, dependendo do potencial aplicado no contato da porta, o semicondutor poderá conduzir tanto lacunas como elétrons.

A influência do material presente nos eletrodos do transistor com P3HT diz respeito à maior facilidade de se encontrar materiais que injetam portadores de cargas positivas do que negativas, como é o caso do ouro (Au). Contudo, na teoria é possível incorporar materiais aceitadores de elétrons para os eletrodos, porém eles podem ter comportamento instável e não operar da forma adequada.

Outro ponto a se considerar é a quantidade de armadilhas presentes no material, visto que no P3HT a quantidade de armadilhas de elétrons é amplamente maior do que de armadilhas de lacunas, facilitando consideravelmente o fluxo destas pela extensão do filme. Dependendo da densidade de armadilhas, o fluxo de portadores pode ser seriamente afetado e consequentemente, menor será a corrente para uma determinada tensão na porta.

Para este estudo, foi considerado o trabalho de Nicolai *et al.* (2012), no qual é feito um entendimento melhor de como funciona o transporte de cargas por elétrons. Foram determinados alguns parâmetros de armadilhas a partir de regressões numéricas usando um modelo gaussiano de armadilhas, em que  $N_T = 4 \times 10^{17} cm^{-3}$  e LUMO - HOMO = 2 eV.[23] Desta forma, foram geradas as características de transferência e de saída para um transistor de filmes finos de P3HT, contidos nas figuras 4.29 e 4.30.



Figura 4.29: Gráfico da característica de transferência do transistor para o material P3HT



Figura 4.30: Gráfico da característica de saída do transistor para o material P3HT

Esses resultados ratificam o comportamento ambipolar do P3HT em situações ideais e independentes de influência externa, visto que a densidade de armadilhas de elétrons de  $4 \times 10^{17} cm^{-3}$  é

aproximadamente três ordens inferior a densidade de elétrons mencionada na figura 4.4, o que faz que o fluxo de portadores livres seja pouco prejudicado pelas capturas realizadas pelas armadilhas.

### 4.7 Discussões sobre Mobilidade

O termo mobilidade elétrica remete à facilidade que portadores de cargas têm de se difundir em um meio, sendo dependente da intensidade do campo elétrico exercido.[24] Vários estudos feitos em sistemas orgânicos sem forma definida (amorfos) comprovaram que a mobilidade das lacunas é geralmente superior a dos elétrons. Uma explicação plausível para isso é que o número de armadilhas de elétrons é superior ao de lacunas.[25] Portanto, muitos estudiosos consideram que as armadilhas têm efeito direto na mobilidade de um material orgânico.

Entretanto, é proposta uma discussão acerca disso nessa seção, pois nas simulações realizadas, não houve efeitos diretos na mobilidade do semicondutor, e sim influências imediatas sobre o comportamento da capacitância do óxido. Como foi abordado na tabela 4.2, o parâmetro  $C_{fit}$ da simulação correspondente à capacitância por área do óxido é inversamente proporcional ao aumento da densidade de armadilhas de elétrons. Deve-se ponderar que a mobilidade utilizada para descrever o semicondutor foi bastante simplificada e foi considerada constante ao longo de todo o filme.

Resgatando os valores de  $C_{ox} = 1,15 \times 10^{-7} F/cm^2$  e  $\mu = 3,24 cm^2 V^{-1} s^{-1}$  das seções 4.2 e 4.3, respectivamente, é possível estabelecer uma nova relação para o impacto das armadilhas sobre a mobilidade:

$$\mu C_{fit} = \mu_{extraído} C_{ox} \tag{4.8}$$

A variável  $\mu_{extraído}$  refere-se à mobilidade extraída a partir da equação (4.8), em que o efeito das armadilhas em  $C_{fit}$  é transferido para essa mobilidade. Dessa forma, como a tabela 4.4 traduz, quanto maior a densidade de armadilhas de elétrons no semicondutor, menor é a mobilidade e consequentemente, menor é a corrente no canal de ligação entre fonte e dreno no semicondutor.

Densidade de armadilhas $(cm^{-3})$	$C_{fit} \ (C/cm^2)$	$\mu_{extraído} \ (cm^2/V.s)$
$N_t = 0$	$8,51\times 10^{-8}$	$2,40\times10^{-4}$
$N_t = 10^{20}$	$4, 5 \times 10^{-8}$	$1,31\times 10^{-4}$
$N_t = 10^{21}$	$9,15\times10^{-9}$	$2,58\times10^{-5}$
$N_t = 10^{22}$	$1,01\times 10^{-9}$	$5,64\times10^{-6}$
$N_t = 10^{23}$	$1,03\times10^{-10}$	$2,90\times 10^{-7}$

Tabela 4.4: Tabela com resultados das mobilidades extraídas a partir do parâmetro  $C_{fit}$ 

### 4.8 Equação Característica do Transistor com Impacto das Armadilhas

As equações (4.6) e (4.7) foram usadas para criar uma relação entre corrente e tensão quando fosse usada a estratégia de regressões lineares. Porém, ainda não foi especificado como seriam as características de transferência e de saída quando o fator de temperatura  $l_n$  baseado na distribuição exponencial das energias das armadilhas fosse inserido na equação. Quando  $l_n > 1$ , a corrente passa ser limitada pelas armadilhas, conforme apresenta a equação (2.38). Partindo da mesma análise realizada na seção 2.1 da Revisão Bibliográfica, a equação que descreve a concentração de portadores livres a partir da tensão da porta com expoente incluído é:

$$Q = C_{pot}(V_{gs} - V_{TH})^b \tag{4.9}$$

Aplicando os mesmos passos feitos nas equações (2.3) até (2.11), a equação característica ganha a seguinte forma:

$$I_{ds} = -\mu_n \frac{W}{L} C_{pot} \int_0^L (V_{gs} - V_{TH} - V_{ch}(y))^b \frac{dV_{ch}}{dy} dy$$
(4.10)

Mudando as variáveis da integral de y para  $V_{ch}$ :

$$I_{ds} = -\mu_n \frac{W}{L} C_{pot} \int_0^{V_{ds}} (V_{gs} - V_{TH} - V_{ch})^b \, dV_{ch}$$
(4.11)

Usando novamente o método da substituição, em que  $\tilde{V_{ch}} = V_{gs} - V_{TH} - V_{ch}$  e  $\frac{d\tilde{V_{ch}}}{dV_{ch}} = -1$ , a equação (4.11) se transforma em uma integral trivial.

$$I_{ds} = -\mu_n \frac{W}{L} C_{pot} \int_{V_{gs} - V_{TH} - V_{ds}}^{V_{gs} - V_{TH}} -\tilde{V_{ch}}^b d\tilde{V_{ch}}$$
(4.12)

Resolvendo a integral para os intervalos  $V_{gs} - V_{TH} \in V_{gs} - V_{TH} - V_{ds}$ , determina-se a equação característica para distribuições exponenciais de armadilhas em modo triodo:

$$I_{ds} = \mu_n \frac{W}{L} \frac{C_{pot}}{b+1} [(V_{gs} - V_{TH} - V_{ds})^{b+1} - (V_{gs} - V_{TH})^{b+1}]$$
(4.13)

Os mesmos procedimentos podem ser seguidos para estabelecer a equação característica para distribuições exponenciais em modo de saturação. Portanto:

$$I_{ds} = -\mu_n \frac{W}{L} \frac{C_{pot}}{b+1} (V_{gs} - V_{TH})^{b+1}$$
(4.14)

Em posse das equações (4.13) e (4.14), é possível gerar os gráficos das características de transferência e de saída para várias distribuições exponenciais de armadilhas. Nesse caso, foi considerado que  $N_T = 10^{21} cm^{-3}$ , a largura é 100 vezes maior do que o comprimento do semicondutor e que a mobilidade de 3,24  $cm^2V^{-1}s^{-1}$  é a mesma do experimento 1 da seção 4.3. Além disso, ao fazer a aproximação de uma reta em um gráfico loglog a fim de determinar o valor de  $V_{TH}$ , a tensão de limiar aproximada que se adaptou para todas as curvas foi de 1,5 V.



Figura 4.31: Gráfico da característica de transferência do transistor para tensões positivas na porta com  $V_{ds} = 5$  V,  $N_T = 10^{21} cm^{-3}$  e variando o valor do fator  $l_n$ 



Figura 4.32: Gráfico da característica de saída do transistor para tensões positivas na porta com  $V_{gs} = 5$  V,  $N_T = 10^{21} cm^{-3}$  e variando o valor do fator  $l_n$ 

Como esperado, a distribuição exponencial das energias de armadilhas proveniente do fator  $l_n$  causou grande impacto nas características elétricas do semicondutor. O valor de  $C_{pot}$  decaiu severamente quando  $l_n$  aumentou e o expoente b tem valor próximo de  $l_n$ .

## Capítulo 5

## Conclusões

Esse trabalho focou na apresentação de um modelo unidimensional simplificado da Equação de Poisson que pudesse investigar as características de um transistor de filmes finos orgânico. O modelo foi baseado no potencial elétrico e em distribuições exponenciais das densidades das cargas, com o objetivo de ilustrar os efeitos que as armadilhas intrínsecas do semicondutor podem acarretar para as concentrações de cargas livres e para as características corrente  $\times$  tensão. Para isso, foi utilizada a ferramenta matemática MATLAB, que permitiu fazer cálculos numéricos e analíticos de forma rápida e intuitiva.

O transistor abordado, do formato top-gate/bottom-contact, foi modelado numericamente usando equações algébricas lineares e matrizes. A discretização só foi possível graças ao uso de variáveis adimensionais, que eram multiplicadas por constantes com dimensão inversa. A equação parcial de segunda ordem que representa a Equação de Poisson foi modelada em um cálculo iterativo, onde o resultado era transferido para as equações que definiam as densidades das cargas e então retornava para equação principal, até que todas elas convergissem.

Uma vez que o desenvolvimento do modelo fosse concluído, os resultados de densidade de portadores livres e potencial de superfície foram interpretados. Em primeiro lugar, para um semicondutor livre de armadilhas, confirmou-se que os elétrons e lacunas eram atraídos ou repelidos, conforme a tensão que era aplicada na porta.

Em seguida, os gráficos de densidade de cargas livres foram gerados e duas propostas para explicar os comportamentos das curvas foram feitas. Para magnitudes de tensões pequenas, a regressão linear foi suficiente para averiguar como as cargas se portavam para tensões acima da tensão de limiar. No entanto, no geral, a estratégia de regressão de potência foi mais efetiva em interpretar os gráficos, pois adiciona mais um parâmetro ao cálculo e portanto, mais precisão à representação. Além disso, a regressão de potência se adaptou bem quando as armadilhas no sistema foram consideradas para uma distribuição exponencial delas pelas bandas de energia. Por esse motivo, ela foi incorporada ao cálculo, uma vez que é representada por um expoente na equação de corrente limitada pelas armadilhas.

As características de transferência e de saída foram calculadas primeiramente em regime livre de armadilhas, no qual a primeira estratégia de *fitting* foi suficiente para fornecer os parâmetros de capacitância por área e tensão de limiar. O mesmo pôde ser feito ao introduzir diversas concentrações de armadilhas, em que se observou uma retração da corrente à medida que mais armadilhas eram introduzidas no semicondutor, graças à redução do número de portadores livres. Contudo, como foi mencionado acima, o fator de distribuição exponencial das armadilhas requereu que fosse utilizada a estratégia de regressão de potência, que por sua vez gerou resultados que explicam a maior captura das cargas livres pelas armadilhas quando o fator era incrementado. Isso ocorre porque quanto maior o fator, mais energia térmica é necessária para que a carga possa escapar da armadilha na banda proibida.

O estudo com P3HT foi realizado a fim de proporcionar uma análise mais real e profunda sobre o impacto das armadilhas. Assim, verificou-se que esse impacto não é tão grande para a densidade de armadilhas desse semicondutor orgânico, porém, se esse número fosse maior, haveria mudanças drásticas no sentido de diminuir a corrente e de alterar o comportamento linear da concentração de portadores. Por isso levanta-se a questão de avaliar os efeitos das armadilhas para materiais orgânicos retirados da natureza, que contêm muitas imperfeições, e que portanto, possuem grandes densidades de armadilhas.

Por fim, foi levado à tona uma discussão envolvendo a mobilidade, no qual se questionou a redução da mobilidade pela presença de armadilhas. Esse modelo considerou uma capacitância no dielétrico que era afetada diretamente por elas, enquanto se usava uma mobilidade constante. Dessa forma, a nova mobilidade era extraída do modelo a partir de uma equação simples, relacionando a mobilidade constante, a capacitância no óxido real e a capacitância derivada do processo de regressão linear.

### 5.1 Trabalhos Futuros

Alguns trabalhos futuros a partir desse estudo são sugeridos:

1) Usar dados produzidos no Laboratório de Dispositivos e Circuitos Integrados da Universidade de Brasília para extrair mobilidade;

2) Fazer uma solução analítica para esse modelo em vez de simulações numéricas;

3) Criar modelos de duas e três dimensões para o transistor de filmes finos;

4) Verificar impacto das armadilhas em outros tipos de semicondutores orgânicos, bem como materiais retirados diretamente da natureza;

5) Dopar o semicondutor orgânico a fim de satisfazer as armadilhas e dessa forma, melhorar a mobilidade e transformá-lo em intrínseco;

6) Melhorar o modelo para a mobilidade, em que a partir de dados reais de densidade de cargas, seja possível incorporar mobilidades variáveis e autoconsistentes;

7) Usar um perfil diferente para a distribuição da densidade de armadilhas no semicondutor, em que há maior concentração em regiões perto da interface com o dielétrico.

## **REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

- KOMMURU, H. B.; MAHMOODI, H. ASIC Design Flow Tutorial Using Synopsys Tools. San Francisco, CA, Spring 2009.
- [2] SEDRA, A. S.; SMITH, K. C. *Microelectronic Circuits*. 6th. ed. New York Oxford: Oxford University Press, 2010.
- [3] SWART, J. W. Evolução de microeletrônica a micro-sistemas. CCS e FEEC-UNICAMP, 2000.
- [4] ABER, W. Thin film transistors & flexible displays. MSE, 2006.
- [5] SHARMA, A.; MADHU, C.; SINGH, J. Performance evaluation of thin film transistors: History, technology development and comparison: A review. *International Journal of Computer Applications*, v. 89, n. 15, p. 36–40, 2014.
- [6] DEPARTAMENTO DE FÍSICA UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA UNESP. Aplicações de Transistores de Filme Fino em Displays Transparentes e Flexíveis.
- [7] SITE INOVAÇÃO TECNOLÓGICA. Como evitar armadilhas na eletrônica de plástico. Disponível em: <www.inovacaotecnologica.com.br/noticias/noticia.php?artigo=armadilhaseletronica-plastico>.
- [8] LABORATÓRIO DE OPTOELETRÔNICA ORGÂNICA E SISTEMAS ANISOTRÓPICOS - UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA. Eletrônica Orgânica. Disponível em: <a href="http://loosa.paginas.ufsc.br/eletronica-organica/">http://loosa.paginas.ufsc.br/eletronica-organica/</a>>.
- [9] ZANCHIN, V. R. Análise do desempenho elétrico de transistores orgânicos visando a fabricação sobre substratos flexíveis. Dissertação (Mestrado) — Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.
- [10] CHIACCHIO, R. S. Montagem e caracterização de um dispositivo eletrônico usando polímero condutor. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Química - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2004.
- [11] MATERIALS, T. R. E. *N-type Organic Semiconductors and Conductors*. Disponível em: <a href="http://www.tda.com/eMatls/ntype.htm">http://www.tda.com/eMatls/ntype.htm</a>>.
- [12] PAUL, C. R. Eletromagnetismo para Engenheiros: com aplicações a sistemas digitais e interferência eletromagnética. 1. ed. [S.l.]: LTC, 2006.

- [13] HASSAN, A. K.; GOULD, R. D. The electrical properties of copper phthalocyanine thin films using indium electrodes. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 22, n. 8, p. 1162, 1989. Disponível em: <a href="http://stacks.iop.org/0022-3727/22/i=8/a=022">http://stacks.iop.org/0022-3727/22/i=8/a=022</a>>.
- [14] ULABY, F. Eletromagnetismo para Engenheiros. Bookman, 2007. ISBN 9788577800858. Disponível em: <a href="https://books.google.com.br/books?id=abqVCYcFV4UC">https://books.google.com.br/books?id=abqVCYcFV4UC</a>.
- [15] VÖLKEL, A. R.; STREET, R. A.; KNIPP, D. Carrier transport and density of state distributions in pentacene transistors. *Physical Review B*, v. 66, n. 195336, November 2002.
- [16] MAJID, Z. A.; HASNI, M. M.; SENU, N. Solving second order linear dirichlet and neumann boundary value problems by block method. *IAENG International Journal of Applied Mathematics*, v. 43, n. 2, p. 71–76, 2013.
- [17] LESSMANN, R. Medindo Mobilidade de Portadores em Materiais Orgânicos. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Paraná, Janeiro 2005.
- [18] HWANG, W.; KAO, K. C. A unified approach to the theory of current injection in solids with traps uniformly and non-uniformly distributed in space and in energy, and size effects in anthracene films. *Solid-State Electronics*, v. 15, p. 523–529, 1972.
- [19] MOREIRA, N. C.; JÚNIOR, E. G.; CARMO, F. P. do. Equação de poisson via método diferenças finitas. XXXIV Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, p. 1393–1394, 2012.
- [20] ROCHO, V. da R. Métodos Iterativos para a Solução da Equação de Poisson. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Matemática - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Abril 2012.
- [21] KAO, K. Dielectric Phenomena in Solids. Elsevier Science, 2004. ISBN 9780080470160. Disponível em: <a href="https://books.google.com.br/books?id=MxvRST5PT1cC">https://books.google.com.br/books?id=MxvRST5PT1cC</a>.
- [22] MOTTI, S. G. Espectroscopia não linear de interfaces aplicada ao estudo de transistores poliméricos. Dissertação (Mestrado) — Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.
- [23] NICOLAI, H. T. et al. Unification of trap-limited electron transport in semiconducting polymers. *Nature Materials*, v. 11, p. 882–887, October 2012.
- [24] ZEGHBROECK, B. V. Principles of Semiconductor Devices 2.7.2 Carrier Mobility.
- [25] TONEZER, C. O problema da mobilidade em sistemas orgânicos desordenados modelado por uma equação mestra. Dissertação (Mestrado) — Setor de Ciências Exatas - Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2007.

# ANEXOS

### I. RESULTADOS ADICIONAIS



Figura I.1: Gráfico da característica de transferência do P3HT com amostras usando a raiz quadrada da corrente e regressão linear para médio peso molecular



Figura I.2: Gráfico da característica de transferência do P3HT com amostras usando regressão não-linear para médio peso molecular



Figura I.3: Gráfico da característica de transferência do P3HT com amostras usando a raiz quadrada da corrente e regressão linear para alto peso molecular



Figura I.4: Gráfico da característica de transferência do P3HT com amostras usando regressão não-linear para alto peso molecular

### II. FUNÇÕES MATLAB ADICIONAIS

Simulador da Equação de Poisson para tensões positivas na porta:

```
function positive_Vgs_simulator(n,lp,ln)
% This is a simulator of an one-dimensional Poisson's Equation for positive gate voltages.
% n is the number of points sampled
\% lp is the temperature factor for holes (1 <= lp <= 2)
\% ln is the temperature factor for electrons (1 <= ln <= 2)
% Constants
% Electron charge (elementary charge)
q = 1.6 \times 10^{(-19)}; \% C
% Silicon intrinsic density of electrons and holes
niSi = 10^(10); % cm^-3
% Silicon Energy Band Gap
Eg0 = 1.2; % eV
% Organic Semiconductor Energy Band Gap (P3HT)
Eg = 2; % eV
% Dielectric relative permittivity (SiO2)
Ed = 3.9;
% Semiconductor relative permittivity (P3HT)
Es = 3;
% Vacuum permittivity
E0 = 8.854 \times 10^{(-14)};  F/cm
% Semiconductor length
L = 40 \times 10^{(-7)}; \% cm
% Dielectric length
d = 30 \times 10^{(-7)}; \% cm
% Interval (step) length
a = L/n;
% Gate voltage
Vgs = 0.001; % V
% Boltzmann constant
%Boltzmann = 1.38*10^ (-23); % J/K
Boltzmann = 8.617*10^(-5); % eV/K
% Temperature
T = 300; %K
% Positive-charged trap density
Pt = 0;
Pt = 10^{(7)}; \ cm^{-3}
% Negative-charged trap density
%Nt = 0;
Nt = 10^{(21)}; %cm^-3
```

```
% Counters and variable initializations
```

```
erro = 1;
erropx = 1;
erronx = 1;
k = 1;
graphcount = 1;
% Initialization of surface voltage variable
Vs = Vgs;
% Boltzmann constant multiplied by the temperature
Vt = Boltzmann*T; % V
% Organic semiconductor carrier concentration
niOSC = niSi \cdot exp(-(Eg - Eg0)/(2 \cdot Vt));
% Scale factor calculation
phi0 = (q*a.^2*niOSC) / (Es*E0);
% Poisson Matrix generation
A = create_matrix(n-1);
% Initialization of Matrices
F = ones(n-1, 1);
xx = ones(n-1,1);
X = ones(n-1, 1);
nx = ones(n-1, 1);
px = ones(n-1, 1);
nf = ones(n-1, 1);
pf = ones(n-1, 1);
pot = ones(n-1,1);
% Initial iteration
for i = 1:n-1
    nx(i) = 1; % niOSC scale
    px(i) = 1; % niOSC scale
    % Carrier concentration over the semiconductor
    F(i) = px(i) - nx(i);
    % Interval of the semiconductor
   xx(i) = i;
end;
% Boundary condition calculation
F(1) = F(1) + Vs/phi0;
% Poisson equation
X = inv(A) *F;
\% Here you can vary the gate voltage (V)
while Vgs <= 40
    % External loop (Exit condition is more tolerant)
    while erropx > 0.001
```

```
FormerPx = px;
% Intermediary loop (Stricter exit condition)
while erronx > 0.00025
   FormerNx = nx;
    % Inner loop (Stricter exit condition)
    while erro > 0.00025
        % Register of former value of Vs
       FormerVs = Vs;
        % Carrier concentration over the semiconductor
       F = px - nx;
        % Surface voltage calculation
       Vs = Vgs/(1 + (Es*d)/(Ed*a)) + X(1)*phi0/((Ed*a)/(Es*d) + 1);
        % Damping in order to achieve convergence
        Vs = 0.2*Vs+0.8*FormerVs;
        % New boundary condition
       F(1) = F(1) + Vs/phi0;
        % Solution of Poisson's Equation
       X = inv(A) *F;
        % Deviation
        erro = abs((Vs - FormerVs)/Vs);
    end;
    % Electrons density calculation for each point
    for j = 1:n-1
        % Free electrons
       nf(j) = exp(X(j)*phi0/Vt);
       % Electron traps
        ntrap(j) = nf(j)*(Nt/niOSC)*(exp(-Eg/(2*ln*Vt))*(exp((X(j)*phi0/Vt)*((1-ln)/ln))))
       % Sum of both charges and damping
       nx(j) = nf(j) + ntrap(j);
        nx(j) = 0.2*nx(j) + 0.8*FormerNx(j);
    end;
    % Deviation
    erronx = max(abs((nx - FormerNx)./nx));
    erro = 1;
end;
```

```
% Holes density calculation for each point
```

```
for i = 1:n-1
       % Free holes
       pf(i) = exp(-X(i)*phi0/Vt);
       % Hole traps
       ptrap(i) = pf(i)*(Pt/niOSC)*(exp(-Eg/(2*lp*Vt))*(exp((X(i)*phiO/Vt)*((lp-1)/lp))));
       % Sum of both charges and damping
       px(i) = pf(i) + ptrap(i);
       px(i) = 0.2*px(i) + 0.8*FormerPx(i);
   end;
    % Deviation
   erropx = max(abs((px - FormerPx)./px));
   erronx = 1;
   erro = 1;
end;
% Final step
% Recalculation of holes and electrons density
for i = 1:n-1
   nx(i) = exp(X(i)*phi0/Vt)*(1 + (Nt/niOSC)*(exp(-Eg/(2*ln*Vt))*(exp((X(i)*phi0/Vt)*((1-ln)/
   F(i) = px(i) - nx(i);
end;
% Boundary condition and Poisson's Equation
Vs = Vgs/(1 + (Es*d)/(Ed*a)) + X(1)*phi0/((Ed*a)/(Es*d) + 1);
F(1) = F(1) + Vs/phi0;
X = inv(A) *F;
% Damping
FormerPx = px;
FormerNx = nx;
FormerVs = Vs;
% Last iteration
for i = 1:n-1
   px(i) = exp(-X(i)*phi0/Vt)*(1 + (Pt/niOSC)*(exp(-Eg/(2*lp*Vt))*(exp((X(i)*phi0/Vt)*((lp-1)
   nx(i) = exp(X(i)*phi0/Vt)*(1 + (Nt/niOSC)*(exp(-Eg/(2*ln*Vt))*(exp((X(i)*phi0/Vt)*((1-ln)/
end;
Vs = Vgs/(1 + (Es*d)/(Ed*a)) + X(1)*phi0/((Ed*a)/(Es*d) + 1);
% Display current point
display(k);
% Deviation for next iteration
errornx = max(abs((nx - LastNx)./nx));
errorpx = max(abs((px - LastPx)./px));
error = abs((Vs - LastVs)/Vs);
```

```
%Mobile Charge Carrier Concentration
    % Length over z axis
    z = 0:L/(n-2):L;
    % Free carrier concentration
    cx = -pf + nf;
    % Total carrier concentration
    %cx = px - nx;
    % Integral over semiconductor length
    c(k) = trapz(z, cx);
    % Optional
    if(mod((k-1), 5) == 0 || k == 1)
        for i = 1:n
            Pxgraph(graphcount,:) = px;
            Nxgraph(graphcount,:) = nx;
        end;
        graphcount = graphcount + 1;
    end;
    % Gate voltage increment, in order to repeat the calculation for a new
    % Vgs
   Vgs = Vgs + 0.1;
    % Surface voltage
    pot(k) = X(1);
    % Next point of simulation
    k = k + 1;
end;
% Graphs
% C vs Vgs
c = niOSC*q*c;
Vqs = 0.001:0.1:40;
figure;
semilogy(Vgs,c);
ylabel('Concentração de cargas livres (C/cm^2)','fontsize',18);
xlabel('Tensão na porta (V)','fontsize',18);
% Surface potential vs Vgs
pot = phi0*pot;
figure;
plot(Vgs,pot);
ylabel('Potencial na interface (V)','fontsize',18);
xlabel('Tensão na porta (V)','fontsize',18);
% Voltage in each position
```

```
phi = phi0*X;
xx = 10^(7) *a*xx; % xx in nm
figure;
plot(xx,phi);
ylabel('Tensão ao longo do semicondutor (V)', 'fontsize',18);
xlabel('Posição no semicondutor (nm)','fontsize',18);
% Holes vs position
Pxgraph=Pxgraph*niOSC;
figure;
%plot(xx,px,xx,px*Pd0/ni,xx,px*(1+Pd0/ni));
%semilogy(xx,px,xx,px*Pd0/ni,xx,px*(1+Pd0/ni));
for k = 1:graphcount-1
    plot(xx,Pxgraph(k,:));
    hold on;
end;
hold off;
ylabel('Densidade de lacunas (cm-3)','fontsize',18);
xlabel('Posição no semicondutor (nm)', 'fontsize',18);
% Eletrons vs position
Nxgraph=Nxgraph*niOSC;
figure;
%plot(xx,nx,xx,nx*Nd0/ni,xx,nx*(1+Nd0/ni));
%semilogy(xx,nx,xx,nx*Nd0/ni,xx,nx*(1+Nd0/ni));
for k = 1:graphcount-1
    plot(xx,Nxgraph(k,:));
    hold on;
end;
hold off;
ylabel('Densidade de elétrons (cm-3)', 'fontsize',18);
xlabel('Posição no semicondutor (nm)', 'fontsize',18);
```

#### Função Criar Matriz:

```
function A = create_matrix(n)
% This function generates a matrix which represents the second derivative of the Poisson Equation
```

```
A = zeros(n,n);
for i = 1:n
    for j = 1:n
        if (i==j)
            A(i,j) = 2;
        elseif (i==j-1)
            A(i,j) = -1;
        elseif (i==j+1);
            A(i,j) = -1;
        end
        end
end
```

Curva característica de transferência do transistor:

```
function curvaIV_Vgs_positive(n,Cpot,Vt,b)
% This function generates the curve Ids x Vgs
% n is the number of sampled points
% Cpot (or Cfit) is the oxide capacitance per area extracted from the fit
% Vt is the threshold voltage extracted from the fit
% b is the exponent extracted from the fit (if the regression is linear,
% set this value to 1.
% Mobility (cm^2 x V^-1 x s^-1)
mi = 3.25 \times 10^{(-4)};
% Proportion between width and length of the semiconductor
WL = 100;
% Elementary charge (C)
q = 1.6 \times 10^{(-19)};
% Interval (step) length (set here the maximum Vgs) (V)
a = 40/n;
% Fixed source-drain voltage (V)
Vds = 5;
figure;
%while Vds >= 0
% Set the intervals of Vgs
for i=1:n-1
   Vgs(i) = i*a;
% Linear mode
if(Vds < (Vgs(i) - Vt))</pre>
    J(i) = -((mi*WL*Cpot)/(b+1))*((Vgs(i) - Vt - Vds).^(b+1)-(Vgs(i) - Vt).^(b+1));
% Quadractic mode
elseif (Vqs(i) < Vt)</pre>
    J(i) = 0;
else
    J(i) = ((mi*WL*Cpot)/(b+1))*(Vgs(i)-Vt).^(b+1);
end;
end;
% Graphs
plot (Vqs, J*10^6);
ylabel('Corrente entre dreno e fonte (uA)','fontsize',18);
xlabel('Tensão entre porta e fonte (V)', 'fontsize',18);
```

```
% hold on;
% Vds = Vds - 1;
% end;
% hold off;
```

Curva característica de saída do transistor:

```
function curvaIV_Vds_positive (n,Cpot,Vt,b)
% This function generates the curve Ids x Vds
% n is the number of sampled points
\ Cpot (or Cfit) is the oxide capacitance per area extracted from the fit
% Vt is the threshold voltage extracted from the fit
% b is the exponent extracted from the fit (if the regression is linear,
% set this value to 1.
Mobility (cm<sup>2</sup> x V<sup>-1</sup> x s<sup>-1</sup>)
mi = 3.25 \times 10^{(-4)};
% Proportion between width and length of the semiconductor
WL = 100;
% Elementary charge (C)
q = 1.6 \times 10^{(-19)};
% Interval (step) length (set here the maximum Vds) (V)
a = 40/n;
% Fixed gate voltage (V)
Vgs = 5;
figure;
%while Vgs >= 0
% Set the intervals of Vds
for i=1:n-1
    Vds(i) = i * a;
% Triode mode
if(Vgs >= Vt && Vds(i) < (Vgs - Vt))</pre>
    J(i) = -((mi * WL*Cpot) / (b+1)) * ((Vgs - Vt - Vds(i)).^(b+1) - (Vgs - Vt).^(b+1));
% Saturation mode
elseif(Vgs >= Vt && Vds(i) >= (Vgs - Vt))
    J(i) = ((mi * WL * Cpot) / (b+1)) * (Vgs - Vt) .^{(b+1)};
% Cut-off
else
    J(i) = 0;
end;
end;
```

```
% Plot graph
plot(Vds,J*10^(6));
ylabel('Corrente entre dreno e fonte (uA)','fontsize',18);
xlabel('Tensão entre dreno e fonte (V)','fontsize',18);
```

```
% hold on;
% Vgs = Vgs - 1;
% end;
% hold off;
```

## III. DESCRIÇÃO DO CONTEÚDO DO CD