

# Modélisation d'un Transistor Organique à Effet de Champs et à Nanostructures d'Or

Christophe Krzeminski

## ► To cite this version:

Christophe Krzeminski. Modélisation d'un Transistor Organique à Effet de Champs et à Nanostructures d'Or. 2023. hal-04589746v2

# HAL Id: hal-04589746 https://hal.science/hal-04589746v2

Preprint submitted on 13 Feb 2025

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Public Domain

## Modélisation d'un Transistor Organique à Effet de Champs et à Nanostructures d'Or.

Christophe Krzeminski

### Résumé:

Ans le cadre du traitement non-conventionnel de l'information, divers composants alternatifs divers ont été et sont proposés. Ici, les études de modélisation physique portent sur les caractéristiques électroniques d'un transistor classique à effet de champs réalisé à partir d'un canal semiconducteur organique, le pentacène, mais comportant des nanostructures d'or de taille nanométrique. Le caractère original de ce dispositif est probablement l'influence de ces nanostructures au niveau du transport électronique dans le canal du semiconducteur organique. Ce réseau de nanostructures d'or nonpériodique pourraient moduler les phénomènes de transport des charges libres injectées dans le canal organique du transistor et avoir une influence, au niveau électronique, proche d'une grille flottante. Ce phénomène de grille pourrait être effectivement utilisé, de manière élégante, afin d'implémenter des effet électrostatique similaire à des phénomènes synaptiques physiologiques en utilisant des variation et des corrélation d'états de charges dans le domaine temporel. La simulation et la compréhension du composant réalisé est bien évidemment loin d'être exacte mais probablement, nécessaire au niveau applicatif et circuit. En terme de propriétés de matériau, les propriétés dynamiques de transport ainsi que la durée en terme de retenue de charge sont probablement les paramètres clefs de ce dispositif. Ainsi, une conjecture vraisembable serait que ce composant, à effet de charge surfacique, serait plus proche d'une technologie in-fine classique de transistor de mémoire à grille flottante basé ici sur un canal semiconducteur organique, que d'un dispositif de type "memristor" ou "neuromorphique" envisagé.

Mots clefs descriptifs: Traitement non-conventionel de l'information, transistor à effet de champs, technologie à grille flottante, semiconducteur organique, pentacène, réseau non-organisé de nanoparticules d'or, effet transitoire, durée de retention de charges, mécanisme synaptique, "plasticité neuronale", "poids synaptique" et corrélation d'états de charges.

Ce document est relatif à la microélectronique, à l'intersection de la physique appliquée, des sciences des matériaux, de la chimie spécifique des semiconducteurs ainsi que des sciences de la calculabilité.

Écrit et synthèse, en langue française, des résultats débuté en janvier 2023 et achevé le 23 mai 2024.

Ce document, en langue française, a été écrit durant la période de janvier 2023 à mai 2024 ; au Laboratoire central iemn, Institut Supérieur d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie, Cité Scientifique, Avenue Henri Poincaré, 59652 Villeneuve d'Ascq. Cette étude a été réalisée dans le cadre du projet européen FP7-ICT-2011-8 SYMONE ("Synaptic Molecular Networks for Bio-Inspired Information Processing") et l'ANR SYNAPTOR ("Synaptic MOlecular NEtworks for bio-inspired information processing") de l'Agence Nationale de la Recherche française.

## Sommaire

A)	A) Introduction							
	a)	Traiteme	ent de l'information et architecture	4				
	b)	Disposit	if non-linéaire et propriétés synaptiques	4				
B)	Simula	ation		6				
	a)	Structur	e du dispositif non-conventionnel	6				
	b)	Propriét	és électroniques en régime statique	6				
	c)	Grille flottante et régime transitoire						
C)	Résult	ats		11				
	a)	Caractéi	ristiques des propriétés statiques	11				
		i)	Transistor organique pristine à effet de champs	11				
		ii)	Influence du réseau de nanostructures d'or et charge surfacique	12				
			Écrantage électrostatique	12				
			Influence de la charge surfacique sur le courant de drain $\hdots$	12				
			Simulation par éléments finis	13				
	b) Modèle phénoménologique et propriétés dynamiques							
		i)	Description	14				
		ii)	Simulation phénoménologique en transitoire	14				
D)	Discus	ssion		16				
	a)	Hypothè	ese de la grille flottante en régime statique	16				
	b)	Complex	kité du régime transitoire et poids synaptique	16				
	c)	Proprié	tés synaptiques et mécanismes physiologiques	17				
		i)	Modèle de poids synaptique biophysique	17				
		ii)	Mécanisme synaptique électronique et physiologie	19				
E)	Conclu	usions		20				
Réfé	rences			24				
App	endice			27				

#### A). INTRODUCTION

L a calculabité classique est basée sur le modèle de VON-NEUMANN qui en terme d'architecture et d'automate de calcul se fonde sur le principe d'une séparation entre la fonction mémoire et celle de l'étape de calcul utilisant les règles de la logique booléenne et leur organisation séquentielle via des états. Ces états logiques codés, sous la forme élementaire de bits, sont traités par des dispositifs électroniques définis à travers les lois de physique entre une charge électrostatique q, un courant formé I par des porteurs minoritaires de charges mobiles électrons (e<sup>-</sup>), trous (t<sup>+</sup>) [1] et un potentiel électrostatique interne V formé par une jonction matérielle. L'implémentation technologique, en terme de composant microélectronique est un transistor qui est basé classiquement à la fois, sur les structures clefs suivantes, à savoir la jonction MOS (Métal/Oxyde/Semiconducteur) pour la structure de grille ainsi que la jonction PN des régions de sources et de drain dopées (ingénierie de la charge) pour la microélectronique classique.

### A. Traitement de l'information et architecture

En terme d'architecture de traitement non-conventionel [2] [3] et de traitement de l'information [4], différentes tendances actuelles semblent se dessiner et explorent des domaines bien différents à la fois en terme de loi physique, de jonctions de matériaux, d'implémentation en terme de composants voire de leur organisation (table I) :

#### B. Dispositif non-linéaire et propriétés synaptiques

Une alternative, à priori séduisante, au moins sur le principe, serait de réaliser directement, l'opération de traitement de l'information en s'inspirant des mécanismes synaptiques [5] du vivant et leur modulation via des corrélations temporelles existant au niveau des impulsions des signaux neuronaux du cerveau. Ceci implique, en pratique, l'utilisation de matériaux caractérisés par des propriétés hautement non-linéaires notamment en fonction de courant d'espèces diverses. Ce concept introduit, de manière théorique, une classe de dispositif différente des dispositif memristif qui sont caractérisé par une relation hautement non-linéaire f entre un "flux" et un état de charge décrit par une équation d'états:

$$\begin{cases} V = R(\Omega, I)I \\ & \text{Equations d'etats non-lineaire d'un memristor} \\ \frac{\partial\Omega}{\partial t} = f(\Omega, I) \end{cases}$$
(1)

Ainsi, cette étude aborde donc la problématique de la modélisation en terme de composant électronique, inspiré d'une structure de transistor organique classique à effet de champs (OFET) [6] et à base de canal semiconducteur de Pentacène (Pn) au niveau de caractéristiques électrostatiques ou de transport électronique. Les problématiques, en régime dynamique, ainsi que la modélisation des propriétés dîtes synaptiques sont approfondies mais d'une manière phénoménologique permettant de faire un lien entre le régime dynamique et les variations d'un "poids synaptique"  $\Omega$  maximal. Enfin, l'implémentation ou la conceptualisation en terme physique de ce poids synaptique est discuté.

### B). SIMULATION

### A. Structure du dispositif non-conventionnel

A structure du dispositif [7] étudiée (Figure 1) a été simulée en utilisant le simulateur de procédé par élement finis Athena [9]. Celle-ci est proche d'un transistor organique consistué par un substrat de silicium intrinséque dopé au bore  $[C_B] = 10^{21} \text{at/cm}^3$  d'une longueur de 3  $\mu$ m et d'une hauteur de  $2 \mu m$ . L'étape d''oxydation thermique permettant la réalisation d'un oxyde épais de silicium (SiO<sub>2</sub>) d'une épaisseur de 200 nm est simulée par un simple dépôt. L'étape primordiale en terme de procédé technologique [10], dans la fabrication de ce dispositif est une étape de procédé chimique et la fonctionalisation de la surface de cet oxyde thermique par une couche moléculaire auto-assemblée terminaison amine permettant l'integration d'une couche de nanostructures d'or [11] via l'immobilisation de nanocristaux d'or en solution colloidale de diamètre de l'ordre de 10 à 20 nm [5]. Ce réseau auto-assemblé de nanostructures d'or non-périodique est la clef en terme de fonctionnalité originale espérée du dispositif [8] [12]. Très sommairement, les étapes technologiques de dépôt de différents matériaux et de gravure sont simulés pour aboutir à deux empilements titane (10 nm)/or (80 nm)/couche de pentacène formé par évaporation (30 nm). La couche de pentacène nanostructuré englobant le réseau de nanostructures d'or permet d'implémenter une structure proche OMO (organique/nanostructures d'or/organique) [13] de transistor caractérisé par un canal de conduction de nature semi-conductrice entre les deux empilements différents définissant les zones de source et de drain. Il est à noter que l'espacement entre ces deux empilements est par contre d'un  $\mu$ m dans la structure simulée. La simulation [9] des différents procédés technologiques de fabrication permet de définir finement la topologie du dispositif symétrique au sommet décrite par un maillage non-linéaire formé via les élements finis.

#### B. Propriétés électroniques en régime statique

 $\mathbf{E}^{N}$  terme, cette fois de simulation des caractéristiques électriques, les deux empilements métalliques permettent de définir les électrodes de source et de drain. L'électrode de grille étant définie par un contact au bas du substrat. Le travail de sortie des deux électrodes  $\phi_{source}$  et  $\phi_{drain}$  est identique de 4.9 eV et le contact de grille arrière  $\phi_{grille}$  lui est de 4.3 eV. Le pentacène, matériau organique est assimilé à un semiconducteur caractérisé par une largeur de bande interdite  $\mathbf{E}_g$  de 2.2 eV, une affinité électronique  $\mathbf{E}_a$  de 2.7 eV, une permittivité diélectrique statique relative  $\epsilon_r$  de 3 au niveau de ce matériau ainsi qu'une densité de défauts importante de l'ordre de  $10^{21}$ cm<sup>-3</sup> caractéristique des semiconducteurs organiques. Au niveau de la modélisation du contact entre les régions de contact et le matériau semiconducteur Pentacène, il s'agit donc d'un mécanisme d'injection de charges [14]. La mobilité macroscopique  $\mu_{t^+}$  des porteurs minoritaires dans la couche organique est supposée similaire pour les deux types différents de porteurs libres à  $\mu_{e^-} = \mu_{t^+} = 0.02 \text{ cm}^2/V \cdot s$  et est décrite selon le modèle de Poole-Frenkel. Cette mobilité macroscopique du matériau est à priori hautement sensible [ $10^{-4}, 0.3$ ] cm<sup>2</sup>/V.s à l'ordre moléculaire intrinsèque du semiconducteur organique ainsi qu'au procédé technologique utilisé à sa fabrication [15]. L'influence éventuelle du réseau de nanostructures d'or sur cette mobilité n'est pas connue [16]. Il est vraisembable que ces nanostructures d'or n'ont pas un effet simple de "dopants" [17] au niveau du pentacène.

La simulation de la distribution de charge et des porteurs minoritaires sous l'application d'un champs électrique  $\vec{E}$  dans la structure via les électrodes est obtenue en résolvant l'équation de Poisson (Equation 2) qui est calculée sur la structure discrétisée en élements finis.

$$\nabla \epsilon \cdot \nabla \vec{E} = \rho$$
 Equation de Poisson (2)

 $\rho$  correspond à la densité de charge globale majoritairement constritué de la densité des trous (t<sup>+</sup>) libres ou la charge capturée par les nanostructures d'or  $Q_{AuNS}$ . Les simulations ont été réalisées via le logiciel Atlas [18] qui est plutôt bien adapté en pratique au domaine des semiconducteurs et des composants organiques. Les différentes propriétés statiques concentration de trous, champs électrique, densité de courant ([t<sup>+</sup>],  $V, \vec{E}, J_{\vec{x}}(t)$ ) ont été extraites et ré-analysés au prix d'une interpolation mais en utilisant ici une grille linéaire (Figure 2).

En régime statique du composant pristine, un potentiel élevé négatif est appliqué au niveau de l'électrode de drain (-35 Volts) et de grille arrière, l'électrode de source étant au potentiel nul ce qui permet de disymétriser la structure grâce au champs électrostatique et génère ainsi une variation de potentiel entre l'électrode de source et de drain (Figure 2.a), l'électrode de la source étant elle à potentiel nul. Chaque caractéristique est calculée en augmentant progressivement le potentiel appliqué au niveau de l'électrode de drain, avec comme conditions initiales, la distribution de potentiel en fonction du potentiel de grille préalablement calculé. Cette distribution de potentiel génére une concentration de trous libres dans le canal déplété de l'ordre de  $2 \cdot 10^{17}$  at/cm<sup>3</sup> dans un canal quasiment déplété pouvant atteindre 8 · 10<sup>19</sup> at/cm<sup>3</sup> près de l'électrode de drain (figure 2.b). Les équipotentielles sont localisées principalement sous la source du dispositif au niveau du premier empilement de grille et et confinées au niveau de la surface dans l'oxyde de silicium SiO<sub>2</sub>. Il en résulte ainsi une distribution bidimensionnelle du champs électrique  $\vec{E}$  le long des deux orientations (Figure 2.c). La composante  $\vec{E_x}$  latérale est maximale sur une largeur de 150 nm cette fois au niveau de l'électrode de drain. La composante principale du champs électrique est ainsi orientée latéralement et atteint une valeur maximale de 2  $\cdot$  10 $^{6}$  V  $\cdot$  m<sup>-1</sup> à l'interface avec l'électrode de source. Celle-ci diminue d'une manière graduelle jusqu'à l'inversion de signe à l'interface avec l'électrode de drain. Il peut être souligné que les variations des composantes latérales et longitudinales sont opposées. La densité de courant de trous  $\vec{J_x}(t^+)$  nanométrique est quasiment surfacique à l'échelle micrométrique en contact avec l'oxyde de silicium. Celle-ci est maximale, au niveau de la composante latérale, en lien avec la composante du champs précisèment au niveau de l'empilement de source atteignant une valeur de 170 A/cm<sup>2</sup>. Quant, à la composante verticale de la densité de courant  $J_y(t^+)$ , celle-ci est d'une valeur plus modeste et localisée au niveau du pic de champs électrique et l'électrode de drain. L'image physique obtenue est une densité de courant reliée principalement au mécanisme de dérive lié à la distribution du champs électrique.

A problématique principale est de simuler le comportement de l'effet de la charge retenue par les nanostructures d'or du film organique ce qui n'est pas simple dans le cadre d'un simulateur de dispositif électronique basé sur une description des phénomènes physiques à l'échelle micrométrique. Le fait que la conductivité en surface, dans le canal du dispositif, soit contrôlée par une charge surfacique est le principe même du transistor organique à couche mince. L'hypothèse basique sur un plan de la physique, sur laquelle sont basées ces simulations est que cette couche de réseau nanostructures d'or pourrait être vue en terme de comportement électrique comme une grille flottante capable de retenir sommairement des porteurs de charges libres positives, c'est-à-dire des trous. Celle-ci aurait ainsi une influence via la charge retenue par les nanostructures d'or sur la conductance de la couche nanométrique et semiconductrice de pentacène. Cette hypothèse est réalisée fictivement ndrl, au niveau du simulateur, en considérant en considérant que la structure "OMO" n'est pas si éloignée électriquement d'une structure  $SiO_2/p-Si/SiO_2$ couche d'épaisseur d'un nanomètre de polysilicium (p-Si) avec toutefois le travail de sortie de l'or massif  $\phi_{Au}$ <sup>1</sup>. Cette couche comporte également deux oxydes de silicium d'épaisseur infime de SiO<sub>2</sub> permettant de simuler le phénomène électrostatique de rétention de la charge surfacique (Figure 5) réalisée par l entourant les nanostructures d'or. Cette charge retenue temporairement verrait un potentiel d'équilibre négatif défini par la structure et le potentiel appliqué aux électrodes. Il serait possible d'esquisser sommairement un mécanisme surfacique de charge, et de décharge, de trous de ces nanostructures métalliques via principalement la bande de valence, celle-ci n'ayant pas semble-t-il les caractéristiques du matériau massif [20]. Les nanostructures d'or auraient un caractère accepteur de trous  $(t^+)$  qui se chargeraient progresssivement et pourraient en fonction de l'état de charge des nanostructures avoir un caractère donneur et libéraient progressivement les charges retenues. Par contre, le courant nanométrique de charges positives injecté via effet tunnel du semiconducteur, à ce réseau de nanostructures d'or n'est pas pris en compte au niveau de la modélisation, la charge restant supposée statique au niveau du simulateur. Le formalisme de dérive et diffusion décrivant le transport macroscopique des charges libres dans la structure se fait classiquement par une résolution en élements finis bidimensionnelle (Eq. 3):

$$\frac{\partial[t^+]}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla J_{t^+} + G_{t^+} - R_{t^+} \quad \text{Formalisme de dérive et de diffusion}$$
(3)

où  $[t^+]$  corresponds à la distribution de concentration en porteurs libres de trous ainsi que les densités de courant macroscopiques liées. La densité de courant vectorielle que ce soit pour les électrons ou les trous de deux termes courant de dérive ici principalement lié au champs électrostatique  $\vec{E}$  ainsi qu'à un terme de diffusion dépendant du gradient de concentration des porteurs de charges libres (Eq. 4):

$$\vec{J}_{t^+} = [t^+]|e|\vec{E} + eD_{t^+}\nabla[t^+] \quad \text{Densit\acute{e} de courant de trous}$$
(4)

<sup>1</sup>En toute rigueur, la correction au niveau de travail de sortie des nanostructures d'or du fait de la sphéricité ferait qu'il soit moins élevé  $\phi_{AuNS} = \phi_{Au} + \frac{5.40}{R}$  soit 108 meV pour des nanostructures de ~ 10 nm de diamètre en pratique [21].

Au niveau de ce dispositif, la contribution principale en terme de densité de courant se simplifie en:  $\vec{J_{t^+}} \approx |e|[t^+]\vec{E}$  c'est-à dire un courant de dérive.

#### C). Résultats

#### A. Caractéristiques des propriétés statiques

i) Transistor organique pristine à effet de champs: Les propriétés électriques (Figure 3.a) en régime statique du transistor organique [6] ont étés calculées grâce à Atlas [18] plutôt bien adapté au champs des semiconducteurs organiques. Les caractéristiques électroniques du transistor organique ( $I_{DS}-V_{DS}$ ) ont été simulées pour des tensions entre les régions de source et de drain croissantes  $V_{DS}$  jusqu'au potentiel électrostatique maximum d'une valeur de -35V correspondant à la tension de la grille arrière du dispositif  $V_{GS}$ . Ces caractéristiques dans le régime linéaire peuvent être reliés à la vision classique du courant d'un transistor à effet de champs gouverné par la charge de la capacité Métal/Oxyde/Semiconducteur:

$$Q_{\mathbf{D}} = C_{ox}W \cdot (V_{GD} - V_{seuil}) \tag{5}$$

où W correspond à la notation classique de la largeur de grille et  $C_{ox}$  la capacité de la jonction MOS. La structure du transistor organique classique est caractérisée par une tension de seuil  $V_{Seuil}$  pas strictement nulle [19] mais en théorie serait proche de 1.12 V. Cette valeur extraite en simulation est effectivement compatible avec le potentiel de bande plate, correspondant à l'alignement des niveaux de Fermi du Titane et le niveau au milieu de largeur de bande interdite du pentancène (Figure 4):

$$V_{seuil} = \phi_{Ti} - \chi_{PN} + \frac{E_g}{2}.$$
(6)

Le courant de drain  $I_{DS}$ , dans un transistor à effet de champs, est donné par :

$$I_D = C_{ox} \frac{W}{L} \cdot (V_{GS} - V_{seuil}) \tag{7}$$

et L sa longueur:

$$I_D = \mu_{t+} C_{ox} \frac{W}{L} \cdot (V_{DS} - V_{seuil}) \tag{8}$$

La fréquence maximale du composant  $f_T$  obtenue également en simulation serait-elle de l'ordre de quelques 100 KHz limitant probablement la largeur des impulsions temporelles à une durée quelques millisecondes. En terme de simulation, la correspondance entre les caractéristiques électriques statiques et le régime dynamique n'est pas parfaite mais l'on retrouve par contre la différence entre les niveaux de courant de drain  $I_{DS}$  en régime dynamique avec la forme d'impulsion temporelle. Au niveau simulation, le composant pristine présenterait des caractéristiques bien différentes de la vision expérimentale dans le sens où les variations de courant sont inversées  $I_{DS}(après charge) \geq I_{DS}(avant charge)$  (Figure 3.c). En effet, la simulation pour des durées d'impulsion longue prédit que le courant de drain  $I_{DS}$  après charge est légérement supérieur à celui avant charge du fait de l'application d'un potentiel supérieur à celui initial lié à une concentration en trous libres  $[t^+]$  plus importante. Dans ce cas, la différence de niveau de courant avant et après l'impulsion est représenté Figure 3.c). Au niveau de l'effet transitoire

28 mai 2024

du transistor organique pristine, gouverné principalement par la variation de charge au niveau du canal grâce à l'impulsion de tension  $V_{DS}(t)$ , un contrôle du transport dans le canal semiconducteur éffectué par la grille grâce à la tension appliquée de grille  $V_{GS}$  semble nécessaire afin d'obtenir l'amplitude de la modulation de courant souhaité:

$$I_D = \mu_t + C_{ox} \frac{W}{L} \int_{V_{Source}}^{V_{Drain}} (V_{GS} - V_{seuil})(V, t) dV$$
(9)

*ii)* Influence du réseau de nanostructures d'or et charge surfacique: L'influence au niveau de réseaux de nanostructures d'or déposé sur la surface de  $SiO_2$  génère probablement deux effets physiques principaux. Le premier est lié à la charge électrostatique retenue des nanostructures d'or dans le sens où le potentiel vu par les charges libres du semiconducteur ne sera pas forcément celui défini par l'électrode de grille qui sera écranté électrostatiquement.

a) Écrantage électrostatique: le potentiel formé par cette couche de nanostructures d'or et par la grille flottante  $V_{GF}$  est fonction de cette charge et peut s'exprimer si l'on suppose une distribution continue prenant la forme d'une densité de charge linéique <sup>2</sup>. $\lambda_{AuNS}$  dans le semiconducteur organique. Le phénomène d'écrantage électrostatique implique probablement un contrôle moins important du potentiel de grille. l'étude de l'influence de cette supposée grille flottante (Figure 4.a) a été réalisée au niveau de la couche formée par les nanostructures d'or:

$$V_{GF} = \frac{Q_{AuNS}}{C_{GF}} \cong \frac{\epsilon_0 \epsilon_{C_{22}H_{14}}}{d_{AuNS}} \int \lambda_{AuNS} dq.$$
(10)

b) Influence de la charge surfacique sur le courant de drain: l'influence, au niveau du courant de drain en terme de conductivité du réseau de nanostructures d'or est probablement négligeable par rapport à celui du semiconducteur. Celle-ci sera probablement indirectement influençée électrostatiquement via l'alignement des niveaux d'énergie et le potentiel de bande plate qui gouverne la charge possible transitant dans le semiconducteur organique:

$$V_{seuil} = \phi_{Ti} - \chi_{Pn} + \frac{E_g}{2} - V_{GF} = \phi_{Ti} - \chi_{Pn} + \frac{E_g}{2} - \frac{Q_{AuNS}}{C_{GF}}.$$
 (11)

Il semble raisonable que ce soit cet effet de charge surfacique caractérisé dans des structures de transitor MOS [24] qui se traduit au niveau de la variation de courant dans le semiconducteur organique et dont il est possible d'observer l'effet en régime transitoire. En fonction, du niveau de charge surfacique, cette influence de cette charge sur les caractéristiques d'un transistor à effet de champs peuvent être complexe [23] [24].

 $^2\mathrm{Au}$ niveau synpatisme phisyologique,  $\lambda$  correspond au rythme d'impulsion neuronal [41].

13

c) Simulation par éléments finis: les simulations par élement finis de la structure bidimensionnelle en considérant un niveau de charges linéique fixe croissant retenues de  $[1 \times 10^{-15} - 1 \times 10^{-13}]$  C/ $\mu$ m intégrant l'hypothèse de cette grille flottante montrent également une influence importante des variations du courant de drain de la couche de pentacène en fonction de la charge retenue. Ainsi, un niveau de charge négative va avoir tendance à augmenter le niveau de courant de drain tandis qu'une charge positive va au contraire diminuer le courant (Figure 6.a). Ces résultats confirment l'hypothèse réalisée [26], dans le sens où c'est la densité de charges surfacique proche du semiconducteur pentacène qui va déterminer les propriétés notamment en terme de transport électronique du dispositif. Le potentiel électrostatique global formé par la grille flottante est représenté au niveau de la (Figure 6.b). D'une manière remarquable, les variations de potentiel simulées resteraient très linéaires toutefois pour des niveaux de charges raisonnables portées par la grille flottante et pour des potentiels négatifs. Par contre, il serait nécessaire de polariser négativement à des tensions relativement élevées le composant afin d'obtenir un potentiel de grille significatif dans la structure. Le niveau global en terme de potentiel vu par le canal serait effectivement écranté par la structure du dispositif <sup>3</sup> <sup>4</sup>. L'influence de cette grille flottante implémentée par les nanostructures d'or se manifesterait en régime statique à la fois par la charge retenue et le potentiel électrostatique de grille qui jouerait ainsi un rôle clef à la fois au niveau de la modulation de courant de trous en régime temporel dynamique via l'influence sur la tension de seuil du transistor. L'effet de charge surfacique métallique se traduirait par une perte du contrôle du canal via la tension de grille. Il est également vraisembable que le fait que le potentiel de grille et de drain commun dans les mesures en transitoire n'améliore cette problématique. Malheureusement, le lien existant entre le régime statique et celui dynamique en terme de charges, de potentiel et de courant destiné à des effets de calcul de "poids synaptique" ne peut se faire qu'à un niveau supérieur phénomologique du fait de la complexité à modéliser ces phénomènes transitoires (Figure 7) [25] ou de modèle compact [27] n'intégrant pas forcément ces phénomènes physiques clefs. Par ailleurs, la correspondance entre les modèles macroscopiques de charges ou de courant utilisé par le simulateur et ceux de nature plus nanométrique ne sont pas forcément évident et loin d'être parfait dans cette étude. Malgré tout, il semble possible d'esquisser le fait suivant à savoir que les variations en transitoire du transistor comportant des nanostructures d'or ne serait pas gouvernées par les variations dynamiques classiques de charges du semiconducteur du fait de l'écrantage électrostatique par les nanostructures d'or. Celles-ci auraient un rôle clef au niveau de l'effet mémoire dît "synaptique" par un effet de charge retenue surfacique, un transistor à effet de surface [28]. Cette influence ferait que les variations dynamique de courant en régime transitoire entre le composant pristine avec des effets de champs et le composant comportant une distribution surfacique de nanostructures seraient inversées (Figure 6).d) ?

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Le dispositif serait similaire à un transistor à effet de surface mais sans toutefois de phénomène de conductivité métallique du fait du transport spécifique des nanostructures d'or par percolation et cette charge est réduite  $Q_{AunS}$  par rapport à celle transitant dans le semiconducteur  $Q_D$ .

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Ces variations en théorie pourraient être par contre, non-linéaire, en dehors de gamme de potentiel et de charges représentées notamment pour des tensions positives de grille mais il n'existe pas de conjecture avec l'expérience.

#### B. Modèle phénoménologique et propriétés dynamiques

E modéle phénoménologique décrivant le composant [29] pouvant être utilisé à des niveaux d'abstraction supérieur en terme de conception de circuit est basé sur deux paramètres d'entrée à savoir le courant de drain  $I_{DS}$  et le "poids synaptique"  $\Omega$  du dispositif.

i) Description: Deux phénomènes différents sont intégrés à savoir une dépendance du courant de drain du dispositif, en fonction d'un "poids synaptique"  $\Omega_i$  ainsi que d'une équation d'évolution temporelle caractéristique de la décharge des trous  $(t^+)$  via la nanocouche d'or:

$$\begin{cases} I_{DS} = I_{DS_0} \cdot \exp(-\frac{\Omega_i}{\Omega_0}) \\ \frac{\partial \Omega_i}{\partial t} = -\frac{\Omega_i}{\tau} - \rho \end{cases}$$
 Modéle phénoménologique du poids synaptique. (12)

Ce système d'équations normalisé et en particulier l'estimation du poids synaptique, est résolue de manière numérique simplement en se basant sur une discrétisation temporelle des équations de courant et d'évolution du poids synaptique avec une méthode de type Runge-Kutta (RK4).

ii) Simulation phénoménologique en transitoire: ce modèle simple permet de souligner (Figure 8.a) l'importance de l'étape de charge au niveau de ce composant ainsi que dans la forme du signal transitoire utilisée que ce soit en terme de potentiel électrostatique nécessaire afin de permettre l'injection du courant de trous dans la nanocouche d'or nanostructurée mais aussi en terme de durée compatible avec le temps caractéristique de retenue de ces charges libres. Il illustre également la faible influence ici en terme d'électrocinétique des impulsions brèves de potentiel, ces dernières ne permettant en quelque sorte l'établissement du courant de drain du composant en étant supérieures à la tension de seuil  $V_{seuil}$  ainsi qu'une estimation indirecte du "poids synaptique"  $\Omega_i$ , c'est-à-dire de la charge surfacique libre retenue au niveau du réseau de couche d'or nanostructurée injectée par le niveau de courant de drain  $I_{DS}$ . A l'image d'une capacité non-linéaire, l'essentiel du poids synatique serait formé par la quantité de charges libres  $(t^+)$  retenues. La figure suivante (Figure 8.b) présente la forme transitoire du courant prédite par le modèle phénoménologique. Celui-ci permet de décrire le phénomène de potentiation synaptique dans le sens où le courant de drain avant la phase de charge est bien supérieure à celui après la charge. En terme d'influence, le modèle phénoménologique prédirait une influence mineure du potentiel de lecture  $V_{lecture}$  des impulsions brèves sur la charge retenue au niveau de la couche de nanostructures d'or ainsi que sur le "poids synaptique" et sur son influence sur la variation de courant de drain du composant. Par contre, ce serait la tension de charge  $V_{charge}$  qui serait le seul paramètre physique déterminant sur la charge retenue et le poids synaptique. Pour une tension de charge faible, proche de la tension théorique phénoménologique du transistor, la variation du poids serait très faible inférieure à et pourrait être supérieure à une valeur de 0.5. Le "poids synaptique" maximal résultant pourrait être modulé à-priori

#### D). DISCUSSION

 $E^{N}$  terme de modélisation du composant électronique, la simulation physique, en régime statique, a permis de mettre en lumière, l'influence de certains paramètres comme la charge surfacique retenue sur le transport nanométrique dans le canal du semiconducteur organique ou de façon plus phénoménologique, l'influence de cette charge sur le " poids synaptique" et la forme transitoire du courant  $I_{DS}$  du dispositif.

#### A. Hypothèse de la grille flottante en régime statique

L'hypothèse que, la charge retenue de la couche de nanostructures d'or, serait proche d'une grille flottante permettant de définir localement un potentiel électrostatique modulant la conduction de trous dans le canal de ce transistor n'est pas si irréaliste. Dans ce cadre, le poids synaptique serait plutôt proche de la définition originelle d'un poids synaptique électronique [30], c'est-à-dire principalement liée à la charge de porteurs libres  $\exp(Q_{GF}/Q_D)$  même si le potentiel de la grille flottante est directement relié à cette charge. Toutefois, il convient de relativiser l'hypothèse dans le sens où l'homogéneité latérale et la continuité des propriétés prédites par simulation de la couche de nanostructures est probablement loin d'être idéale, à la fois le potentiel et le champs auront des fluctuations importantes à l'échelle nanométrique liées à la structure faiblement ordonnée de cette couche nanostructurée [12]. Les effets de charge introduites par ces nanostructures, sur les caractéristiques électroniques statiques, restent complexes même si les phénomènes capacitifs ont été estimés plus finement [31]. Par ailleurs, ces phénomènes capacitifs pourraient être aussi intéressant pour une estimation indirecte via les variations de courant, de la charge électrostatique moyenne retenue par ces nanostructures visiblement complexe. Enfin, en terme d'assemblage des composants et de circuit, les problématiques d'isolation sont très fins. En effet, il n'existe pas de contact ou de ligne de potentiel spécifiquement dédié à cette grille flottante permettant si l'assemble ces "synapses" que la charge globale électrostatique  $(Q_{GF})$  soit préservée. Enfin, contrairement à d'autres propositions de composant, ces nanostructures d'or ne sont pas forcément en contact direct avec le substrat [12] tandis que les effets dynamiques d'échange de charge et de probablement de percolation entre nanostructures d'or via le semiconducteur pentacène doivent être préservés.

#### B. Complexité du régime transitoire et poids synaptique

Le régime transitoire du transitor organique serait décrit simplement par la variation de charge libres grâce à l'impulsion appliquée. Le contrôle des modulations de courant semble fortement influencé par les phénomènes classiques de transistor et de contrôle du canal. Par contre, cet effet sur le transitoire ne semble pas aussi simple en présence de nanostructures d'or, la modulation de courant sur l'intensité du courant de drain étant inversée. En terme de régime dynamique et transitoire, le lien entre la simulation physique et le modèle phénomènologique n'est pas forcément simple et les deux approches ont

Brouillon

17

probablement chacune leurs limites propres en terme de pertinence physique. Les simulations statiques du composant permettent en fixant de manière ad-hoc le niveau de charges localisées près du canal semiconducteur organique de préciser le phénomène de pincement du canal et de la réduction du courant de drain par les nanostructures d'or. Une modélisation dynamique complète nécessite de prendre en compte le phénomène d'injection de charges [32] via le courant dans le canal du transistor ainsi que la phase de décharge probablement par un phénomène de percolation entre les nanoparticules d'or [33]. L'intégration de ces deux phénomènes et la co-existence de phénomènes de transport nanométrique et des contraintes de simulations standard micrométrique et de mobilité classique de semiconducteur n'est pas évidente au niveau modélisation sauf à maîtriser l'ensemble de la chaîne de modélisation du composant en particulier les différentes échelles nanométrique et micrométrique au niveau de la correspondance des charges. Au niveau de la définition physique du "poids synaptique", il semble exister une large diversité de variables espérant d'implémenter un poids synaptique. Toutes ne semblent pas directement compatible avec une intégration au niveau des fonctionnalités d'un circuit microélectronique logique classique. L'estimation de l'évolution du poids synaptique au niveau applicatif, interprété ici au niveau du composant comme une corrélation d'états de charges au niveau du réeau de nanostructures d'or serait ainsi fortement dépendante de la phase temporelle de charge et d'injection du courant de trous mais aussi du phénomène de décharge déterminant les caractéristiques temporelles de la forme dynamique du courant et de variation du poids synaptique. Phénoménologiquement, il serait possible d'esquisser cette modulation de ce poids "synaptique se traduisant au niveau du courant de drain à travers la corrélation temporelle des deux états de charge, la forme dynamique n'étant pas forcément celle d'une synapse mais plutôt capacitive :

$$\Delta\Omega_{el} \propto <\lambda_{AuNS}(t_{avant\ charge})\lambda_{AuNs}(t_{après\ lecture}) > \exp(-|\Delta t|/\tau)$$
(13)

### C. Propriétés synaptiques et mécanismes physiologiques

i) Modèle de poids synaptique biophysique: en terme de compréhension, des phénomènes mémoire et synaptique dans le champs du vivant [34], l'hypothèse à-priori communément acceptée est un contrôle via un flux hydrodynamique de  $[Ca]_i$  [35] ainsi qu'une diffusion entre synapses. Ces modéles phénoménologiques [36] ou biophysique suggèrent plutôt que le poids synaptique  $\Omega_{ph}$  est directement relié ici à l'évolution et au de la concentration en ions calcium  $[(Ca)_i]^{2+}$  [35]:

$$\frac{\partial \Omega_{ph}}{\partial t} = \frac{1}{\tau_{[Ca]_i^{2+}}} \left( \Omega([Ca]_i^{2+}) - \Omega_{ph} \right) \quad \text{Evolution du poids synaptique physiologique}$$
(14)

où  $[(Ca)_i]^{2+}$  est la valeur postsynaptique de la concentration en ions calcium,  $\Omega_i$  est le poids synaptique physiologique d'équilibre et  $\tau_{[Ca]_i^{2+}}$  un temps caractéristique gouvernant la dynamique de diffusion sous champs électrostatique de concentration ionique ainsi que les relaxations non-linéaire. De plus, la notion de poids synaptique est vue au niveau biophysique comme une caractéristique du couplage entre neurones [37] et est donc bien différent de la vision électronique particulièrement très diverse d'un poids "synaptique" [30].

19

*ii)* Mécanisme synaptique électronique et physiologie: de fait, une analogie sommaire existe entre les modèles physiologiques de transport du vivant, de nature ionique, basés sur la concentration de différentes espèces ioniques et des composants électroniques caractérisés par une dépendance non-linéaire en fonction de la charge ou éventuellement d'autres phénomènes physiques non-linéaires. Toutefois, les mécanismes physiologiques en jeu sont à la fois de nature physique et d'échelle bien différentes par rapport à celle de la microélectronique classique (Table II). L'intersection avec le champs du vivant (Figure 9) en terme de mécanismes de traitement d'information se limite probablement au simple principe synaptique, c'est-à-dire à un essai de la lecture de l'état d'un "poids" c'est-à dire d'un état mémoire précédent en fonction d'un stimuli appliqué [30]. En pratique, il me semble difficile de faire une correspondance directe entre l'organisation des composants électroniques dictée par la maîtrise des phénomènes principalement de nature électrostatique  $^5$  et celle de la biophysique et de la physiologie [38] [39].

 $<sup>^5 \</sup>acute{\rm e}{\rm lectromagnétique}$  pour les plus récents.

### E). CONCLUSIONS

N transistor à effet de champs, comportant un semiconducteur organique nanostructuré, avec des nanoparticules d'or a été simulée. Le dispositif est basé sur une structure de transistor organique classique à effet de champs, le potentiel induisant un courant principalement de nature surfacique et localisé dans la couche semiconductrice de pentacène. Le composant pristine est caractérisé par une linéarité importante des caractéristiques électroniques  $(I_{DS}-V_{DS})$  pour des potentiels peu élevés et des niveaux de courant non négligeable  $\sim$  nA hautement dépendant de la surface de contact. Il n'est pas simple d'essayer de prendre en compte, l'influence du réseau de nanostructure d'or sur le fonctionnement du composant particulièrement en régime dynamique. Toutefois, l'hypothèse d'une grille flottante sommaire implémentée via cette couche nanostructurée ne semble pas si irréaliste. Ainsi, en régime statique, par un simple effet électrostatique de charge surfacique, retenue par la grille supposée flottante permettrait de moduler voir d'interrompre très fortement le courant de trous  $(t^+)$  au niveau du drain dans le canal organique du transistor. L'ensemble des simulations que ce soit statique, mixte ou phénoménologique présenterait un caractère fragmentaire. Toutefois, un lien peut-être réalisé avec le modèle phénoménologique simplifié et le "poids synaptique" du composant pourrait être interprété physiquement comme une corrélation dynamique d'états de charge de la grille flottante. Un composant memristor [42] ou neuromorphique [12]? Probablement pas. Ainsi, le dispositif expérimental proposé n'appartiendrait donc pas à cette catégorie de composants hautement non-linéaire dénommé "memristor" mais serait très proche d'une implémentation fine d'un transistor p-FGMOS [43] [32] en régime transitoire, limité par les caractéristiques physiques intrinsèques en terme de mobilité du semiconducteur organique ainsi que par les propriétés dynamiques libres et de durée de rétention de charges [44] du réseau de nanostructures d'or. Une limite probablement fondamentale de ce composant est que la grille flottante formée par ces nanostructures d'or est incorporée au sein-même du canal en semiconductor organique, le potentiel  $V_{GF}$  local ne [46] permet pas de définir une ligne spécifique en terme de courant et de potentiel dédié spécifiquement au traitement du poids synaptique. Néanmoins, au niveau du dispositif, celui-ci serait probablement d'intérêt pour des calculs dynamiques où le "poids synaptique", la charge retenue est très légère par rapport aux technologies classiques à grille en polysilicium [30]. Enfin, ce dispositif pourrait éventuellement être intéressant, dans une mesure physique indirecte de la charge globale de trous libres retenue ou portée par ce réseau de nanostructures d'or, pas si simple à quantifier ou à maîtriser technologiquement [47] semble-t-il à l'échelle strictement nanométrique [48].

#### Remerciements

L'auteur de l'article remercie vivement ceux qui m'ont inspiré ces simulations via leurs expérimentations et notamment les participants du projet européen SYMONE n°318597 (période 2011-2014) et le projet de l'Agence de la Recherche Française ANR SYNAPTOR 12-BS03-0010 (période 2012-2015). Les résultats présentés, dans ce document, sont issus de ces différents projets. Ce document a été généré en utilisant le logiciel Latex. Les figures, au format vectoriel Postcript, ont été crées via les logiciels libres Gnuplot5.2, Xfig3.2.7a et GNU Octave 4.4.1. Nota-bene, cet écrit a bénéficié d'un recul et d'une période de maturation importante. Mes remerciements au Centre National de la Recherche Française pour m'avoir laisser le temps, en pratique, d'écrire cet article.

GLOSSAIRE

AuNS	Réseau de Nanostructures d'or		
BV	Bande de Valence		
FGMOS	Transistor Métal/Oxyde/Semiconducteur à Grille Flottante		
LTP	Effet de Potentiation ă Long Terme		
MOS	Jonction Métal/Oxyde/Semiconducteur		
ODE	Système d'équations différentielles		
OFET	Transistor à Effet de Champs et à Canal Organique		
OMO	Jonction Organique/Nanostructures d'or métallique/Organique		
Pn	Pentacène $(C_{22}H_{14})$		
RK4	4 Méthode de Runge – Kutta d'ordre 4		
STDP	Plasticité Synaptique à Modulation Temporelle Relative		

Acronyme	Définition	Unité	
$d_{\rm AuNS}$	Diamètredesnanostructures	nm	
C <sub>ox</sub>	Capacité surfacique de la jonction Métal/Oxyde/Semiconducteur	$F \cdot cm^{-2}$	
$\epsilon_{ m r}$	$\epsilon_{\rm r}$ Constante diélectrique relative structurelle		
$\Delta t$	$\Delta t$ Pas de temps discrétisé		
$\vec{E}$	Champs électrostatique appliqué	$V \cdot cm^{-1}$	
Eg	Largeur de bande	eV	
$F_{T}$	Fréquence de transition	Hz	
$G_{t^+}$	Terme de génération de trous $(t^+)$	$cm^{-3}$	
I <sub>DS0</sub>	Courant de Source – Drain normalisé	A	
I <sub>DS</sub>	Courant de Source – Drain	A	
$\vec{J}_x(t^+)$	Composante horizontale de la densité de courant de trous	$A \cdot cm^{-2}$	
$\vec{J_y}(t^+)$	Composante verticale de la densité de courant de trous	$A \cdot cm^{-2}$	
$\phi_{Ti}$	$\phi_{Ti}$ Travail de sortie du titane		
$\chi_{ m Pn}$	$\chi_{\rm Pn}$ Affinité du semiconducteur pentacène		
L	L Longueur de grille		
$\mu_{ m t^+}$	$\mu_{t^+}$ Mobilité macroscopique de trous libres		
$Q_{AuNS}$	Charge nanométrique portée par le réseau de nanostructures d'or	$e \cdot cm^{-2}$	
$Q_{\rm GF}$	Charge linéique de la grille flottante	$C \cdot \mu m^{-1}$	
Q <sub>D</sub>	Charge portée par le semiconducteur	$cm^{-3}$	
ρ	Vitesse de variation de poids synaptique	$mV \cdot s^{-1}$	
$[t^+]$	[t <sup>+</sup> ] Concentration de charges des trous libres		
$\Omega_0$	Poids "synaptique" électronique normalisé	meV	
Ω	$\Omega$ Poids "synaptique" électronique		
$\Omega_{ m ph}$	$\Omega_{\rm ph}$ Poids synaptique physiologique		
τ	au Temps caractéristiques de décharge du réseau de nanostructures		
V	V Potentiel électrostatique global structurel		
V <sub>DS</sub>	V <sub>DS</sub> Tension appliquée entre les régions de drain et de source		
$V_{\rm seuil}$	V <sub>seuil</sub> Tension de seuil du transistor		
W	Largeur de grille du transistor	$\mu m$	

NOTATIONS MATHÉMATIQUES

24

### Bibliographie

- [1] Karl Seeger, "Semiconductor Physics: An introduction", fifth Edition, Springer and Verlag, (1991).
- [2] J. J. Hopfield, "Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities", Proceeding National Science", Vol. 79, p. 2554-2558, (1982).
- [3] S. K. Bose, C. P. Lawrence, Z. Liu, K.S. Makarenko, R. M. J. Van Dammme, H. J. Broersma et W. G. van der Wiel, "Evolution of a designless nanoparticle network into reconfigurable Boolean logic", *Nature Nanotechnology*, Vol. 10, p. 1048, (2015).
- [4] Paul Heremans, Gerwin H. Gelinck, Robert Müller, Kang-Jun Baeg, Dong-Yu Kim et Yon-Young Noh, "Polymer and Organic Nonvolatile Memory Devices", *Chemistry of Materials*, Vol. 23, p. 341-358, (2011).
- [5] Fabien Alibart, Stéphane Pleutin, Olivier Bichler, Christian Gamrat, Teresa Serrano-Gotarredona, Bernabe Linares-Barranco et Dominique Vuillaume, "A memristive nanoparticle/organic hybrid synaptor for neuroinspired computing", Advanced Functional Materials, Vol. 22, n°3, p. 609-616, (2012).
- [6] Gilles Horowitz, "Organic Field Effect Transistors", Advanced Materials, Vol. 10, n°5, p. 365-377 (1998).
- [7] Christophe Novembre, David Guerin, Kamal Lmimouni, Christian Gamrat et Dominique Vuillaume, "Gold nanoparticle-pentacene memory transistor", Applied Physics Letters, Vol. 92, n°10, p. 103314-1 p. 103314-3,(2008).
- [8] Helena Moreira, Jérémie Grisolia, Neralagatta M. Sangeetha, Nicolas Decorde, Cosmin Farcau, Benoit Viallet, Ke Chen, Guillaume Viau et Laurence Ressier, "Electron transport in gold colloidal nanoparticle-based strain gauges", *Nanotechnology*, Vol. 24, p. 095701, (2013).
- [9] Guide d'utilisation, "2D Process Simulation Software", Version 5.18.1.R, © Silvaco International Inc, (2010).
- [10] Su-Ting Han, Ye Zhou, Zong-Xiang Xu, Long-Biao Huang, Xiong-Bo Yang and V. A. L. Roy, "Microcontact Printing of UltraHigh Density Gold Nanoparticle Monolayer for Flexible Flash Memories", Advanced Materials, Vol., (2012).
- [11] Vincenzo Amendola, Moreno Meneghetti, Mauro Stener, Yan Guo, Shaowei Chen, Patricia Crespo, Miguel Angel Garcia, Antonio Hernando, Paolo Pengo et Lucia Pasquato, "Physico-Chemical Characteristics of Gold Nanoparticles", *Analytical Chemistry*, chapitre III, Elsevier, (2014).
- [12] Vwani P. Roychowdhury, David B. Janes et Supriyo Bandyopadhyay, "Collective Computational Activity in Self-Assembled Arrays of Quantum Dots: A Novel Neuromporphic Architecture for Nanoelectronics", *IEEE transactions on Electron Devices*, Vol. 43, n° 10, (1996).
- [13] Chiao-Wei Tseng et Yu-Tai Tao, " Electric Bistability in Pentacene Film-Based Transistor Embedding Gold Nanoparticles", Journal of American Chemical Society, Vol. 131, p. 12441-12450, (2009).
- [14] Y. Hong, F. Yan, P. Migliorato, S. H. Han, J. Jang, "Injection-limited contact in bottom-contact pentacene organic thin-film transistors", *Thin Solid Films*, Vol. 515, p.4032-4035, (2007).
- [15] D. J. Gundlach, Y. Y. Lin, T. N. Jackson, S. F. Nelson et D. G. Schlom, "Pentacene organic thin-film transistorsmolecular ordering and mobility", *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 18, n°3, (1997).
- [16] O. Marinov, M. J. Deen et B. Iniguez, Charge transport in organic and polymer thin-film transistors: recent issues, IEE Proceedings Circuits, Devices and System, Vol. 152, n°3, (2005).
- [17] Björn Lussem, Max. L. Tietze, Hans Kleemann, Christoph Ho, Johann W. Bartha, Alexander Zakhidov et Karl Leo, "Doped organic transistors operating in the inversion and depletion regime", Nature Communications, Vol. 4, p. 2275, (2013).
- [18] Guide d'utilisation, "Device Simulation Software", Version 5.16.3.R, © Silvaco International Inc, Janvier (2013).
- [19] Gilles Horowitz et Philippe Delannoy, "An Analytical model for organic-based thin-film transistors", Journal of Applied Physics, Vol. 70, n°1, p. 469-475, (1991).
- [20] G. K. Wertheim, S. B. DiCenzo et S. E. Youngquist,"Unit Charge on Supported Gold Clusters in Photoemission Final State", *Physical Review Letters*, Vol. 51, n°25, (1983).
- [21] David M. Wood, "Classical Size Dependence of The Work Function of Small Metallic Spheres", Physical Review Letters, Vol. 46, n°11, p. 749-750, (1981).
- [22] Alam, Muhammad, Ananth Dodabalapur et Mark R. Pinto, "A two-dimensional simulation of organic transistors", IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 44, n°8, p. 1332-1337, (1997).
- [23] A. Van Calster et H. J. Pauwels, "Theoretical Influence of Surface States and Bulk Traps on Thin Film Transistor Characteristics, Solid State Electronics, Vol. 18, P; 691-698, (1975).

- [24] J. Peisner, Y. Sangare et Gaëtan Lévêque, "Discrimination between volume and interface traps in C(V) and Photo I(V) experiments on MOS Capacitors", Journal de Physique III, Vol. 3, n°11, p. 2110-2112, (1993).
- [25] Hsiu-Chuang Chang, P. Paul Ruden, Yan Liang et C. Daniel Frisbie,"Transient effects controlling the charge carrier population of organic field effect transistor channels", *Journal of Applied Physics*, Vol. 107, p. 104502 (2010).
- [26] W. Schockley et G. L. Pearson, "Modulation of Conductance of Thin Films of Semi-Conductors by Surface Charges", *Physical Review*, Vol., p. 232-233, (1948).
- [27] Mai van Huy, Olivier Bichler, Christian Gamrat, Yannick Viero, Fabien Alibart et Dominique Vuillaume, "A compact Device Model for Nanoparticle-organics Memory Transistor's Characterization", *Communications in Physics*, Vol. 28, n°3, p. 191-200, (2018).
- [28] H. K. J. Ihantola et J. L. Moll, "Design theory of a surface field-effet transistor", Solid State Electronics, Vol.7, p.423– 430, (1964).
- [29] Olivier Bichler, "Functional Model of Nanoparticle-Organic Memory Transistor as a Spiking Synapse", IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 57, n°11, (2010).
- [30] Chris Dioro, Paul Hasler, Bradley A. Minch et Carver Mead, "Floating-Gate MOS Synapse Transistors", Neuromorphic Systems Engineering: Neural Networks in Silicon, p. 315-337, (1998).
- [31] Keanchuan Lee, Martin Weis, Wei Ou-Yang, Dai Taguchi, Takaaki Manaka et Mitsumasa Iwamoto, "Effects of Gold Nanoparticles on Pentacene Organic Field-Effect Transistors", Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 50, p. 0411601,(2011).
- [32] Axel Thomsen et Martin A. Brooke, "A floating-Gate Mosfet with tunneling Injector-Fabricated Using a Standard Double-Polysilicon CMOS Process", *IEEE Transactions Electron Device Letters*, Vol. 12, n°3, (1991).
- [33] K.-H. Müller, J. Herrmann, B. Raguse, G. Baxter et T. Reda, "Percolation model for electron conduction in films of metal nanoparticles linked with organic molecules", *Physical Review B*, Vol. 66, n°, p. 075417, (2002).
- [34] Guo-qiang Bi et Mu-ming Poo, "Synaptic Modifications in Cultured Hippocampal Neurons: Dependence on Spike Timing, Synaptic Strength, and Postsynaptic Cell type", Journal of Neuroscience, Vol. 18, n°24, p.10464-10472, (1998).
- [35] Harel Z. Shouval, Gadtone C. Castellani, Brain S. Blzis, Luk C. Yeung et Leon Cooper, "Converging evidence for a simplified biophysical model of synaptic plasticity", *Biological Cybernetics*, Vol. 87, p. 383-392, (2002).
- [36] Harel Z. Shouval, "What is the appropriate description level for synaptic plasticity ?", Proceedings of The National Science, Vol. 108, p. 19103-19104, (2011).
- [37] Miriam K. Bell, Maven V. Holst, Christopher T. Lee et Padmini Rangamani, "Dendritic spine morphology regulates calciumdependent synaptic weight change", *Journal of General Physiology*, Vol. 154, n°8, e20112980, (2022).
- [38] Christof Koch et Anthony Zador, "The function of Dentritic Spines: Devices Subserving Biochemical Rather than Electrical Compartmentalization", *The Journal of Neuroscience*, Vol. 13, p. 413-422, (1993).
- [39] Per Jesper Sjöström, Gina G. Turrigiano et Sacha B. Nelson" Rate, Timing and Cooperativity Jointly Determine Cortical Synaptic Plasticity", Neuron, Vol. 32, p. 1149-1164, (2001).
- [40] Anthony Zador, Christof Koch et Thomas Brown, "Biophysical model of a Hebbian Synapse", Proceeding of the National Academy of Sciences, Vol. 87, p. 6718-6722, (1990).
- [41] Michael N. Shadlen et Willain T Newsome,"The Variable Discharge of Cortical Neurons: Implications for Connectivity, Computation and Information Coding", *The Journal of Neuroscience*, Vol. 78, n°10,p. 3870-3896, (1998)
- [42] Kanghong Liao, Peixian Lei, Meilin Tu, Songwen Luo, Ting Jiang, Wenjing Jie et Jianhua Hao, "Memristor based on Inorganic and Organic Two-Dimensional Materials: Mechanisms, Performance and Synaptic Applications", American Chemical Society (ACS), Applied Materials and Interfaces, Vol. 13, p. 32606-32263, (2021).
- [43] Bradley A. Minch et Paul Hasler,"A floating-gate technology for digital CMOS processes", ICAS International Symposium on Circuits and Systems, Vol. 2, p.400-403, (1999).
- [44] Samuel T. Wang, "Charge Retention of Floating-Gate Transistors Under Applied bias Conditions", IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. ED-27, n°1, (1980).
- [45] W. T. Wondmagegn, N. T. Satyala; R. J. Pieper, M. A. Quevedo-Lopez, S. Gowrisanker, H. N. Alshareef, H. J. Stiegler et B. E. Gnade, "Impact of semiconductor/metal interfaces on contact resistance and operating speed of organic thin film transistors", *Journal of Computational Electronics*, Vol. 10, p. 144-153, (2010).

- [47] Esther Rodriguez-Villegas, Mariano Jimenez et Ramon G. Carvajal, "On Dealing With the Charge Trapped in Floating-Gate MOS (FGMOS) Transistors", IEEE Transactions on Circuit and Systems II Express Briefs, Vol. 54, n°2, (2007).
- [48] Luis Lechaptois, Yoann Prado et Olivier Pluchery, "KPFM visualisation of the Schottky barrier at the interface between gold nanoparticles and silicon", *Nanoscale*, Vol. 15, p. 7510-7516, (2023).

[49]

#### APPENDICE

Le "poids synaptique" électronique est décrit phénoménologiquement et physiquement par un système équation différentielle (ODE) décrivant cette évolution et son l'influence sur le courant de drain (Eq. 15):

$$\begin{cases} \frac{\partial \Omega}{\partial t} = -\frac{\Omega}{\tau} - \rho \\ & \text{Modèle phénoménologique} \\ I_{DS} = I_{DS_0} \cdot \exp(-\frac{\Omega}{\Omega_0}) \end{cases}$$
(15)

Ce modèle phénoménologique nécessite différentes constantes normalisées au composant étudié ( $\Omega_0 = 160 meV$ ,  $I_{DS0} = 8 \cdot 10^{-20} A$ ,  $\tau = 2s$ ,  $\rho_0 = 0$ )

La discrétisation de système d'équations temporellement au temps  $t_i$  par rapport à  $t_{i-1}$ , avec un laps de temps  $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ , permet d'aboutir à l'équation suivante (Eq. 16):

$$\begin{cases} \Omega_{i} = [1 - \frac{\Delta t}{\tau}] \cdot \Omega_{i-1} - \rho_{i} \Delta t \\ \text{Discrétisation du poids } \Omega_{i} \text{ au temps } t_{i}/t_{i-1}. \end{cases} (16)$$

$$I_{DSi} = I_{DS_{0}} \cdot \exp(-\frac{\Omega_{i}}{\Omega_{0}})$$

L'utilisation, d'une méthode de type Runge-Kutta (RK4), permet d'interpoler classiquement l'évolution de ce poids sous la forme de quatre moments  $(k_1, k_2, k_3, k_4)$  menant à l'(Eq. 17):

$$\begin{cases}
k_{1} = -\frac{\Omega_{i-1}}{\tau} - \rho_{i-1} \\
k_{2} = -\frac{\Omega_{i-1}}{\tau} + \frac{k_{1}\Delta t}{2\tau} - \frac{(\rho_{i} + \rho_{i-1})}{2} \\
k_{3} = -\frac{\Omega_{i-1}}{\tau} + \frac{k_{2}\Delta t}{2\tau} - \frac{(\rho_{i} + \rho_{i-1})}{2} \\
k_{4} = -\frac{\Omega_{i-1}}{\tau} + \frac{k_{3}\Delta t}{2\tau} - \rho_{i}
\end{cases}$$
(17)

qui permet d'intégrer numériquement la contribution de ces différents termes:

$$\begin{cases} \Omega_{i} = \Omega_{i-1} + \frac{\Delta t}{6} \cdot (k_{1} + 2 \cdot k_{2} + 2 \cdot k_{3} + k_{4}) \\ I_{DSi} = I_{DS0} \cdot \exp\left[-\alpha(\frac{V_{i}}{V_{seuil}}) \cdot \exp(-(\frac{\Omega_{i}}{\Omega_{0}})\right] \end{cases}$$
 Système numérique discrétisé ( $\Omega_{i}, V_{i}, I_{DSi}$ )  
(18)

Ce dernier système d'équations discrètes (Eq. 18) est résolue indépendamment des outils classiques de conception en microélectronique, permettant d'accéder à l'évolution temporelle en régime transitoire et dynamique du "poids synaptique" du dispositif envisagé utilisé au niveau du calcul corrélatif et applicatif. La tension de seuil du modèle phénoménologique considérée est-elle par contre de 15 Volts et qui doit prendre de manière phénoménologique le potentiel  $V_{FG}$ .

## FIGURES

1	Dispositif transistor à canal organique et nanostructures d'or $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	29
2	Caractéristiques électriques statiques du dispositif organique pristine $\ldots \ldots \ldots \ldots$	30
3	Caractéristiques classiques théorique électriques $\hdots \hdots \hdddt \hdots \hdots$	31
4	Alignement des niveaux de Fermi	32
5	Evolution de la densité de courant en fonction de la charge linéique	33
6	Courant, potentiel de grille, caractéristiques électriques et "poids synaptique" quasi-statique	34
7	Proposition d'un mécanisme de charge/décharge des nanocristaux d'or $\ldots \ldots \ldots \ldots$	35
8	Modélisation phénoménologique en régime transitoire	36
9	Transistor p-MOS; p-FGMOS et synapse du vivant ?	37



Fig. 1. Principe de la structure du dispositif simulé basé sur un transistor à canal organique et nanostructuré via des nanostructures d'or.





Fig. 2. Caractérisations statiques du composant organique. a) Variation du potentiel électrostatique en fonction de la position latérale entre les empilements de source et de drain, le long du canal de pentacène pour un potentiel de source nul, an position latérale entre les empilements de source et de drain, le long du canal de pentacène pour un potentiel de source nul, an potentiel égal à -35V. b) Variation du potentiel électrostatique généré en fonction de la profo**Recuilen** niveau de l'électrode de source, du canal et de l'electrode de drain. La couche d'oxyde de silicium (SiO<sub>2</sub>) permet effectivement d'écranter les variations du potentiel électrostatique dans le substrat de silicium. La densité de porteurs libres dans le dispositif est principalement des trous  $t(^+)$  dans la couche semiconductrice  $\sim 2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Les variations de potentiel se situent donc principalement au niveau de la surface supérieure du dispositif et au niveau du canal situé entre les régions de





Fig. 3. Caractéristiques classiques du courant de drain  $I_{DS}$  en fonction de la différence de tension Source/Drain  $V_{DS}$  du dispositif à canal organique en l'absence de nanostructures d'or. La tension de seuil du transitoire organique classique est proche de 1 Volt. Une simulation en régime transitoire montre que l'étape de charge a une influence modeste sur le courant de drain. D'une manière suprenante, le niveau de courant de drain  $I_{DS}$ , au niveau de l'impulsion de potentiel, ne serait pas identique mais très légérement supérieur (5.6 %). Après charge, du fait d'une concentration de trous libres  $(t^+)$  légérement plus importante ( $\Delta Q = C\Delta V$ ) selon le simulateur dans le semiconducteur après le potentiel de charge. c) Augmentation du niveau de courant avant/après impulsion pour le composant pristine. Celles-ci sont inversées par rapport au composant comportant des nanostructures d'or, ce résultat confirme que l'influence primordiale des nanostructures d'or dans les phénomènes de réduction de courant transitoire.



Alignement des niveaux de Fermi

Fig. 4. Alignement des niveaux de Fermi Métal/SiO<sub>2</sub>/Pentacène et position des bandes de valence et de conduction du semiconducteur



Fig. 5. Représentation, en échelle logarithmique, de la densité de courant  $\vec{J}_x(t^+)$  en  $(A/cm^2)$  en fonction de la charge portée  $Q_{GF}$  par le réseau de nanostructures d'or a)  $Q_{GF} = 10^{-15} \text{ C}/\mu\text{m}$  b)  $Q_{GF} = 10^{-14} \text{ C}/\mu\text{m}$  c)  $Q_{GF} = 10^{-13} \text{ C}/\mu\text{m}$  d)  $Q_{GF} = 2 \cdot 10^{-13} \text{ C}/\mu\text{m}$ . La réduction progressive du courant de trous de la structure et le pincement du canal de pentacène progressif au niveau de l'électrode de drain par un simple effet surfacique de charges fixes est mise en évidence via la simulation. La charge entraînerait un glissement progressif vers un canal quasiment déplété .

33



(c)

(d)

Fig. 6. a) Variation du courant de drain  $I_D$  du dispositif organique en fonction de la charge portée par la grille flottante Q ( $Q_{FG} = C_{FG} \cdot V$ ). En accord ici avec l'expérience, la simulation montre que charge positive portée par les nanostructures d'or explique la réduction du courant de Drain au niveau statique. b) Potentiel de la grille flottante en fonction de cette même gamme de charge électrostatique. La formation de ce potentiel localisé pourrait expliquer simplement les variations du courant de drain en fonction de la charge retenue par un simple décalage au niveau de la tension de seuil. Toutefois, au niveau nanométrique, ce potentiel de grille est probablement écranté et réduit par les nanostructures métalliques et non-homogène latéralement. c) Caractéristiques électriques du dispositif pour une charge linéique de 8  $10^{-16}C\mu$ m. Elles sont caractéristiques d'une influence importante de l'surfacique de charge et de la perte d'influence du potentiel appliqué. d) Une estimation par une approche quasi-statique des variations du poids synaptique ici en fonction de la charge retenue par rapport à une référence non-chargée. Le régime de "poids synaptique' prédit de manière quasi-statique serait bien plus en accord avec les expérimentations avec un régime négatif avec une charge positive retenue. Seul manque la simulation dynamique et transitoire de cette charge. Cette comparaison ne serait pas parfaite, le niveau se situant autour de[ 3.2  $10^{-17}$ -8  $10^{-16}$ ] C/ $\mu$  avec une densité estimée expérimentalement de  $2 \cdot 10^{12}$  charges/cm<sup>2</sup> [7]



Fig. 7. a)Esquisse d'un mécanisme de charge surfacique des nanostructures d'or via le semiconducteur Pentacène. Une partie du de courant de trous  $(t^+)$  injecté permettrait un phénomène de charge surfacique de ces nanocristaux d'or (AuNS) via la bande de valence du semiconducteur pentacène au travers des molécules gréffées sur les nanostructures. b) Mécanisme de décharge surfacique des nanostructures d'or à travers la conduction de trous de la bande de valence (BV) du semiconducteur organique. Un phénomène d'échange de ces trous libres  $(t^+)$ , via un mécanisme de percolation entre les nanostructures d'or, n'est pas à exclure. Le phénomène de charge discrète de Coulomb de ces nanostructures métalliques  $\delta V = dQ_{AuNS}/C_{nano}$ permettrait d'expliquer le caractère ambipolaire (accepteur/donneur) et une durée de retenue faible des charges libres capturées. [33]





Fig. 8. Modélisation en transitoire du régime "synaptique". Divers résultats théoriques du modèle phénoménologique permettant de décrire les variations de drain du composant en fonction du potentiel appliquéé et de son état de charges. a) Variation du "poids synaptique"  $\Omega(t)$  en fonction de la forme du transitoire au niveau du potentiel de l'électrode de drain. La variation du "poids synaptique"  $\Omega(t)$  serait finalement très proche de la forme d'une charge progressive d'une capacité non-linéaire formée par la couche nanostructurée en fonction du potentiel appliqué. b) Forme du courant de drain .c) Variation du maximum du "poids synaptique"  $\Omega_m ax$  en fonction du potentiel de charge. Le "poids synaptique" du fait de la charge retenue aurait une dépendence linéaire au potentiel de charge et également par effet capacitif au courant de trous injecté.



Fig. 9. En fonction du niveau de charge surfacique croissante portée au niveau de la grille du composant (pMOS, OFET et nanostructures, FGMOS, il serait possible d'esquisser un glissement d'un composant gouverné principalement par le potentiel de grille à la charge surfacique portée et au potentiel local défini par la grille flottante. Dans ce composant, l'injection et la retenue de trous augmenterait le poids synaptique. Malgré tout, ce composant ndrl basé sur la charge et l'effet de champs serait peut-être le plus proche dans l'esprit d'une synapse mais loin en pratique des principes biophysiques régissant le fonctionnement synaptique du vivant.

## TABLES

Ι	Architecture et traitement de l'information	39
II	Mécanismes électroniques vs mécanismes physiologiques $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	40

38

Physique Variable		Logique	Ordonnancement	Jonction	Composant	Architecture
Electrocinétique	Courant de charges	Booléenne	Séquentielle	CMOS	Transistor	Von-Neumann
Electrochimie	flux d'espèces	Corrélative	Distribué	MIIM	Memristor	Réseau de neurones ?
		Corrélative			Memristor	
Magnétisme	Spin	Booléenne	Séquentielle	TMR	Mémoire	Matricielle

Tab. I. Architecture (Propriétés physiques, variables physiques, logique, matériau, composant et organisation) et les différents domaines appliqués au dispositif de traitement de l'information. Les caractéristiques de ces différents domaines du traitement de l'information, au sens large, sont complétement différentes sur un niveau architectural.

Fonction	Mécanismes physique	Électronique	Physiologie	
Etat	Accumulation	Charges	Concentration d'ions	
Entrance	Seuil	Champs électrique interne, grille	Activité, multiple	
Transport	Conduction	Porteurs libres $(e^-,t^+)$	Flux hydrodynamique,diffusif	
Régime	Commutation	Inversion	Potentiel d'action membranaire	
Sortance	Conduction	Niveau d'intensité	Rythme, durée	
Interconnexion	Couplage	Potentiel (Kirchoff), lignes	Moléculaire et ionique	
		Unidirectionnelle	Bidirectionnelle	
Commutation	Oscillation	Synchrone (Horloge)	Asynchrone	
Organisation	Séquentielle	Matricielle	Cellulaire	

Tab. II. Fonction et mécanisme de traitement de l'information et leur traduction ou transduction en électronique, ou en physiologie dans le domaine du vivant. L'électronique, inspirée du vivant, serait une tentative de transposition des phénomènes synaptique du cerveau humain avec semble-t-il des verrous significatifs de la physiologie que ce soit en terme de nature de signaux ou des mécanismes biophysiques en jeu. Autant, l'ensemble des mécanismes physiques régissant la commutation des composants électroniques sont très majoritairement synchrones défini via des signaux d'horloge, leur organisation et interconnexion matricielle autant le fonctionnement biophysique zynaptique du vivant semble être fondamentalement de nature asynchrone, cellulaire, de flux d'espèces ioniques, bidirectionnelle et diffusive en terme d'interconnexion neuronale.

INDEX

### А

Architecture Von-Neumann, 4, 29

### С

Calcul Dynamique Synaptique, 14

Canal Conduction,6 Capacité Non-linéaire, 11

Caractéristiques Electriques, 11 Champs électrique, 8, 30

Charges libres Trous, 8, 30

Composant "Neuromorphique", 13

Courant de trous, 7, 31

Memristor ?, 4, 14

Transistor p-FGMOS, 9

Corrélation Etats de charges, 17

### D

Densité de charge surfacique, 12, 13, 33, 34

Drain,7

### Е

Effet mémoire, 4, 17

Equations de dérive et diffusion, 8 de Poisson, 7 Poids synaptique (physiologique), 17 Poids synaptique électronique, 17 Transistor Caractéristiques I-V, 3, 11, 31, 34

Transistor à grille flotttante Caractéristiques I-V, 9, 34

Evolution Temporelle, 14, 36

### F

Fonctionnalisation de Surface, 6

Formalisme Dérive et diffusion, 8

Forme Transitoire, 11

Forme transitoire Charge, 14 Décharge, 14

### G

Grille Grille flottante, 9

Corrélation de charges, 17

42

### Pincement, 13

Plasticité Synaptique, 12, 17, 40

Poids Physiologie, 40 Synaptique 40 Propriétés statiques,

### R

Régime Déplétion, Dynamique et transitoire, 14 Statique, 6 Transitoire, 12 Région Drain, 6 Grille, 6 Source, 6 Répartition

Courant, 7 Potentiel, 7

## S

Semiconducteur Bande de Valence, 8

Mobilité Macroscopique, 6

Organique, 6 Structure, 6

Substrat Silicium, 6

Н

Hypothèse Grille flottante, 9

### I

Impulsion, 10

Isolation

Charge, 11

## L

Logique Boolénne, 4

### Μ

Matériau Hétérojonction, 4, 6 Pentacène, 6 Réseau de nanostructures d'or, 6 Titane, 6

Modélisation Phénoménologique,14

### 0

Ordonnancement Séquentiel, 11

### Ρ

Phénomène Capacitif, 11 Modulation Effet de charge surfacique, 9

## Т

Traitement Séquentiel, 4, 39, 40 Transistor OFET, 6

Charge Effet tunnel, 11 Percolation, 13, 16