

Organische Feldeffekt-Transistoren: Modellierung und Simulation

D I S S E R T A T I O N

zur Erlangung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt

der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Dresden

eingereicht von

Thomas Lindner

geboren am 24.09.1975 in Burgstädt

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN
2005

Gutachter: Prof.Dr. H.Eschrig
Prof.Dr. J.Weber
Prof.Dr. T.Doll

Tag der Einreichung: 22.09.2004
Tag der Verteidigung: 23.03.2005

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Organische Transistoren	5
3	Theoretische Grundlagen	9
3.1	Bauelementesimulation (Drift - Diffusions - Modell)	9
3.2	Anwendbarkeit auf organische Materialien	17
4	Einfluß verteilter Trapzustände auf OFET-Kennlinien	21
4.1	a-Silizium Modell	22
4.2	Transistorstruktur und Materialparameter	23
4.3	Simulierter Einfluß einer exponentiellen Trapverteilung	24
4.3.1	Exponentielle Trapverteilung	24
4.3.2	TOC und BOC Struktur mit unterschiedlicher Source/Drain Austrittsarbeit	25
4.3.3	Variation der Trapkonzentration bei ohmschen Kontakten	34
4.3.4	Effektive Feldeffekt-Beweglichkeit	35
4.3.5	Gaußsche Trapverteilung, tail-Zustände und Dotierung	36
4.4	Vergleich mit Experiment und Hysterese - Effekte	40
4.5	Zusammenfassung	43
5	Source-Gated Dünnschicht - Transistoren (SGT)	45
5.1	Eigenschaften und vorgeschlagene Arbeitsweise	46
5.2	Simulation: Materialparameter	47
5.3	Simulation: Ergebnisse und Diskussion	49
5.4	Zusammenfassung	57
6	Hysterese in organischen MOS Bauelementen	59
6.1	Experimentelle Ergebnisse	59
6.2	Materialparameter	61
6.3	Relevante Zeitkonstanten	62
6.4	Hysterese bedingt durch Ausbildung der Inversionsschicht	64
6.5	Hysterese bedingt durch Bulktraps	67
6.6	Hysterese bedingt durch Grenzflächentraps	75
6.7	Diskussion	77

7	Ambipolare organische Feldeffekt - Transistoren	79
7.1	Eigenschaften ambipolarer Feldeffekt - Transistoren	80
7.1.1	Bauelement auf der Basis von amorphem Silizium	80
7.1.2	Heterostruktur-OFET mit asymmetrischen Source- und Drainkontakten	81
7.2	Zwei-dimensionale Simulation	84
7.2.1	Modellsystem	84
7.2.2	Standard-Materialparameter	85
7.3	Ergebnisse	86
7.3.1	Ambipolare Strom-Spannungs-Kennlinien	86
7.3.2	Innere Feld- und Konzentrationsverteilungen: Analyse der am- bipolaren Arbeitsweise	88
7.3.3	Variation von Dotierung, Kontakteigenschaften, Beweglichkei- ten und Rekombination	91
7.4	Direkte Parameterextraktion: Möglichkeiten und Einschränkungen . .	96
7.5	Zusammenfassung	99
8	Ambipolarer organischer Heterostruktur - Feldeffekt - Transistor	101
8.1	Transistorstruktur und Materialparameter	101
8.2	Auswirkung der Transistorstruktur	102
8.3	Vergleich mit Experiment	106
8.4	Zusammenfassung	109
9	Zusammenfassung	111

Kapitel 1

Einleitung

Im letzten Jahrzehnt hat sich die Elektronik auf der Basis organischer Halbleiter zu einem sehr spannenden und zukunftssträchtiges Forschungsgebiet entwickelt. Dabei geht es nicht um eine Konkurrenz zur etablierten und leistungsfähigen Silizium-Mikroelektronik. Dies ist aufgrund der Materialeigenschaften auch nicht möglich. So ist die Beweglichkeit der Ladungsträger in organischen Materialien deutlich geringer als in Silizium, wodurch organische Bauelemente wesentlich langsamer sind. Ihre Anwendung liegt vielmehr in Bereichen, wo keine große Leistungsfähigkeit sowie kein hoher Integrationsgrad erforderlich sind. Dabei liegt der Vorteil der organischen Elektronik insbesondere in der billigen Herstellung, welche mittels relativ einfacher Prozeßtechniken und ohne aufwendige Hochtemperatur-, bzw. Vakuumprozesse möglich ist. Damit könnten organische Elektronikbauteile eines Tages wesentlich preisgünstiger sein als die konventionelle anorganische Elektronik, wodurch sich wiederum völlig neue Anwendungen erschließen lassen.

Organische Substanzen mit halbleitenden Eigenschaften sind schon seit längerem bekannt. Die ersten organischen Halbleiter wurden vermutlich etwa um 1948 entdeckt [1], erste elektrisch leitfähige Polymere sind seit 1974 bekannt [2]. 1977 gelang es schließlich, die Leitfähigkeit dieser Polymere durch Dotieren um Größenordnungen bis zu metallischer Leitfähigkeit zu erhöhen (Chemie Nobelpreis 2000 - Heeger, MacDiarmid, Shirakawa) [3, 4]. Damit begann schließlich die Forschung auf dem Gebiet der organischen- oder Polymer/Plastik-Elektronik, wenn auch zunächst noch in begrenztem Umfang. In den folgenden Jahren wurde die Verwendung von organischen Materialien in elektronischen Bauelementen wie Schottkydioden [5–7], Transistoren [8, 9], Solarzellen [10, 11] und Leuchtdioden [12, 13] demonstriert.

Seit etwa 1990 haben die internationalen Forschungsaktivitäten auf diesem Gebiet stark zugenommen und führten auch zu einem Engagement der Industrie. Das zunehmende Interesse ist wahrscheinlich insbesondere durch die Erfolge in der Elektrolumineszenz in organischen Materialien begründet und den daraus resultierenden Möglichkeiten einer Anwendung für Anzeigedisplays. So sind erste kommerzielle Anwendungen, auch gerade in diesem Bereich zu finden. Einzelne Firmen bieten heute zum Beispiel Handys oder Autoradios mit Displays auf der Basis von organischen Leuchtdioden an. Zukünftig wird es auch einen Einsatz in größeren Bildschirmen geben, ein erstes funktionsfähiges 40-Zoll-Farbdisplay wurde bereits realisiert. Hier liegt der große Vorteil der organischen Materialien darin, dass diese selbst leuchten. Dadurch ist im Vergleich zu herkömmlichen Flüssigkristall-Flachbildschirmen ein

höherer Kontrast und ein größerer Blickwinkel möglich. Zudem entfällt die bei LCD-Anzeigen benötigte Hintergrundbeleuchtung und es werden keine Farbfilter benötigt. Bisher existieren organische Displays allerdings nur als Passiv-Matrix-Displays oder als Aktiv-Matrix-Display, wobei jedoch die Ansteuerung der einzelnen Pixel über Dünnschicht-Transistoren auf der Basis von amorphen Silizium erfolgt.

Jüngste Entwicklungen haben zum Ziel, organische Feldeffekt-Transistoren in Aktiv-Matrix-Displays einzusetzen [14–17]. Ihr Einsatz ist aber auch in komplementären Schaltungen [18–20] sowie in voll-organischen integrierten Schaltungen [21–24] möglich, was auch schon erfolgreich demonstriert werden konnte. Damit sind selbst integrierte Schaltungen auf flexiblen Substraten möglich [23], was ein großes Feld neuer Anwendungen eröffnen könnte. Ein weiterer möglicher Einsatz der Polymerelektronik wäre zum Beispiel auch in elektronischen Funketiketten (RFID-Tags) und deren vielfältige Einsatzmöglichkeiten z.B. als Ersatz des Barcodes auf Verpackungen, zur Diebstahlsicherung, elektronische Tickets oder als Ausweis in Sicherheitsbereichen. Viele Anwendungen sind allerdings häufig nur bei extrem niedrigen Herstellungskosten realisierbar und somit auch überhaupt nur mit Hilfe der Polymerelektronik denkbar. Am besten geeignet für niedrige Herstellungskosten scheint die Verarbeitung aus der Lösung (spin-coating, dip-coating), was jedoch (bis heute) oft noch mit niedrigen Ladungsträgerbeweglichkeiten in den entsprechenden Schichten verbunden ist. Diese liegen meist im Bereich von $10^{-4}\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$. Allerdings wurden in den letzten Jahren Beweglichkeiten von bis zu $0.1\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ für aus der Lösung aufgebrachte organischen Materialien erreicht [24–27]. Im Vergleich dazu liegt die Beweglichkeit der Ladungsträger in a-Si im Bereich von $4\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ und in kristallinen Silizium beträgt sie $1500\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ für Elektronen und für Löcher $450\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$. Zudem benötigt man für ein anwendungsrelevantes Leistungsvermögen relativ kurze Kanäle, wobei Photolithographie [14] im Submikrometer-Bereich zu kostspielig ist. Mit verschiedenen Strukturierungstechniken wie Siebdruck [28], Tintenstrahldruck [29] oder soft lithographic stamping [30] konnte bisher weder die notwendige Auflösung noch die nötige Justiergenauigkeit erreicht werden. Weiterhin wurden in Ref. [31] vertikale Feldeffekt-Transistoren mit Kanallängen im Submikrometer-Bereich mittels embossing hergestellt, die gemessenen Kennlinien lieferten jedoch keine Sättigung. Transistoren mit einer guten Leistungscharakteristik konnten hingegen in Ref. [32] erreicht werden, wobei eine Unterätztechnik verwendet wurde, um Submikrometer-Kanallängen zu definieren. Indem Source und Drain als undurchsichtige optische Maske zur Definition des Gatekontaktes verwendet wurde, konnte in Ref. [33] ein self-aligned Gate für einen Langkanal-Transistor ($20\mu\text{m}$) hergestellt werden. Neben den noch zu lösenden Problemen bezüglich der Prozess- und Strukturierungstechniken, hält auch die Suche nach geeigneten Materialien weiter an. Bedarf besteht insbesondere noch an geeigneten organischen Isolatoren mit der notwendigen großen Durchbruchfeldstärke ($10^5 - 10^6\text{V/cm}$). Außerdem sind die meisten organischen Halbleiter p-leitend, zur Realisierung von CMOS-Schaltungen werden aber auch n-leitende Materialien benötigt. Realisierte n-Kanal-Transistoren sind jedoch oft sehr empfindlich gegenüber den Umgebungsbedingungen. Weitere Probleme sind, dass gemessene Kennlinien oft Hysterese-Effekte aufweisen [34–36], hohe inverse Subthreshold-Anstiege auftreten [37–39] oder Kurzkanal-Effekte selbst bei größeren Kanallängen von bis zu $12\mu\text{m}$ beobachtet werden [40]. Weiterhin sind auch Haltbarkeit und Betriebsdauer organischer Bauelemente und Schaltungen Ge-

genstand aktueller Untersuchungen [41]. Auch in theoretischer Hinsicht gibt es noch viele offene Fragen. Dazu gehört die Beschreibung des Ladungsträgertransportes in diesen Materialien. Aufgrund der großen Vielfalt der Materialien und ihrer Schichteigenschaften ist eine einheitliche und generell zutreffende Beschreibung wohl auch kaum möglich.

Die Einflüsse verschiedener Größen und Parameter auf die Kennlinien von Bauelementen können sehr komplex sein, eine detaillierte Untersuchung solcher Einflüsse ist nur mittels numerischer Simulation möglich. Zudem ist eine Modellierung erforderlich, um gemessene Daten zu analysieren, ein angemessenes Verständnis der Arbeitsweise eines Bauelementes zu erhalten und wird zur Optimierung von Bauelementstrukturen eingesetzt. Zu diesem Aufgabengebiet soll die vorliegende Arbeit einen Beitrag leisten. In Kapitel 2 wird zunächst auf einige wichtige Grundlagen zu organischen Transistoren eingegangen. Kapitel 3 behandelt einige Grundlagen zur Bauelementesimulation und es wird auf Besonderheiten bei ihrer Anwendung auf organische Materialien eingegangen. Kapitel 4 widmet sich dem Einfluß verteilter Trapzustände auf OFET-Kennlinien. Hintergrund dafür ist die Frage, ob das sogenannte α -Silizium Modell eine adäquate Beschreibung organischer Feldeffekt-Transistoren darstellt. In Kapitel 5 wird im Detail die Arbeitsweise des Source-Gated Dünnschicht-Transistors aufgezeigt. Dies geschieht am Beispiel eines Transistors auf der Basis von α -Silizium als aktiver Schicht. Die Ergebnisse lassen sich jedoch analog auch auf organische Transistoren übertragen. In Kapitel 6 wird gezeigt, wie sich Trapzustände auf quasistatische Kapazitäts-Spannungs-Kennlinien organischer MOS-Kondensatoren auswirken und welche Hysterese-Formen dadurch entstehen können. Dabei geht es um die Frage, ob die Umladung von Trapzuständen Ursache für die experimentell beobachteten Hysteresen in organischen Bauelementen sein kann. Die Thematik von Kapitel 7 und Kapitel 8 ist der double-injection (ambipolar) organische Feldeffekt-Transistor. Anhand einer Einschicht-Modellstruktur ist zunächst ein grundsätzliches Verständnis erlangt worden, die entsprechenden Simulationsergebnisse sind Gegenstand von Kapitel 7. Hingegen wurden vorliegende experimentelle Kennlinien an einer Zweischicht-Struktur gemessen. Dazu werden in Kapitel 8 erste Simulationsergebnisse gezeigt. Teile dieser Arbeit wurden bereits veröffentlicht bzw. sind noch zur Veröffentlichung vorgesehen [E3-E8].

Kapitel 2

Organische Transistoren

Organische Transistoren gehören von ihrer Wirkungsweise her zu den Feldeffekt-Transistoren (FET). Das Grundprinzip besteht darin, dass der Stromfluß in einem leitfähigen Kanal zwischen zwei Elektroden, Source und Drain, durch eine Spannung moduliert werden kann, welche an einer dritten Elektrode, dem Gate, angelegt wird. Dabei gibt es Transistoren verschiedener Bauarten. Der in der Silizium-Mikroelektronik am weitesten verbreitete Typ ist der MOSFET (metal- oxide- semiconductor FET). Ein n-Kanal MOSFET besteht aus einem p-dotierten Substrat, die Source- und Draingebiete sind n⁺- dotiert. Zwischen diesen beiden Gebieten ist die Gateelektrode angeordnet, welche durch ein Gateoxid vom Substrat getrennt ist. Bei einer positiven Spannung am Gate wird nun zunächst das Substrat an der Oxidgrenzfläche an Ladungsträgern verarmt, bis schließlich bei genügend großer Gate-spannung Inversion an der Isolatorgrenzfläche einsetzt. Dann existiert ein leitfähiger Elektronenkanal zwischen den beiden n⁺- dotierten Gebieten und es ist ein Stromfluß zwischen Source und Drain möglich.

Eine weitere Bauart ist der Dünnschicht-Transistor (TFT, thin-film transistor). Er findet vor allem auf der Basis von amorphen Silizium als aktiver Schicht Anwendung, zum Beispiel in Aktiv-Matrix-Displays [14,24]. Diese Struktur ist insbesondere für Materialien mit geringerer Beweglichkeit geeignet. Auch organische Transistoren werden fast ausschließlich in dieser Bauform ausgeführt. Der Querschnitt eines TFT ist in Abb. 2.1 schematisch dargestellt. Für die Gateelektrode wird oft hoch-dotiertes Silizium verwendet, welches gleichzeitig als Substrat dient. Als Isolator wird häufig noch SiO_2 verwendet. Es wurden allerdings auch schon vollständig or-

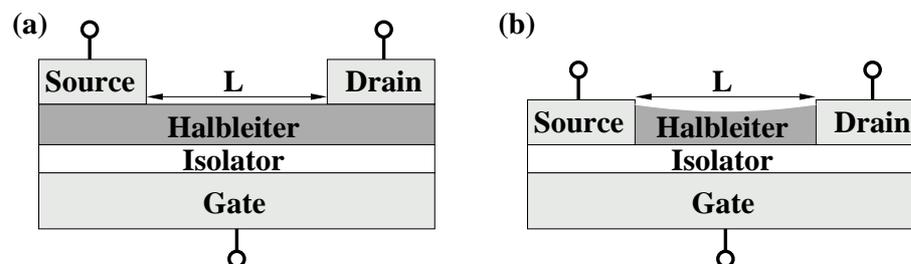


Abbildung 2.1: Querschnitt eines Dünnschicht-Transistors (TFT), top-Kontakt-Struktur (a) und bottom-Kontakt-Struktur (b)

ganische Transistoren realisiert [42]. Dazu könnte man ein Gate-Kontaktmaterial auf einem Substrat abscheiden und anschließend den Isolator aufbringen. Wird der Halbleiter direkt auf dem Isolator abgeschieden und anschließend die Source/Drain-Kontakte aufgebracht, erhält man die top-Kontakt-Struktur (Abb. 2.1a). Werden die Source/Drain-Elektroden vor dem Halbleiter aufgebracht, ergibt sich entsprechend die bottom-Kontakt-Struktur (Abb. 2.1b). Für den in Abb. 2.1 gezeigten Aufbau existiert auch die Bezeichnung bottom-Gate-Struktur. Baut man den Transistor in umgekehrter Reihenfolge auf, also scheidet man zum Schluß die Gateelektrode ab, bezeichnet man die Struktur auch entsprechend als top-Gate-Struktur. Der Aufbau des TFT unterscheidet sich in zweierlei Hinsicht vom MOSFET: Zum einen besteht der Halbleiter nur aus einer sehr dünnen Schicht, gewöhnlich beträgt dessen Schichtdicke $\leq 100\text{nm}$. Zum anderen sind Source und Drain (idealerweise) ohmsche Kontakte. Der Sperrzustand des Transistors erfordert Verarmung der Schicht und der Ein-Zustand wird durch einen Anreicherungskanal realisiert. Der Dünnschicht-Transistor wird also in Anreicherung betrieben und nicht in Inversion wie der MOSFET. Durch Anlegen einer Gatespannung (negativ (positiv) für einen p- (n-) Halbleiter) werden Majoritätsladungsträger an der Isolator/Halbleiter-Grenzfläche induziert, mit zunehmender Konzentration steigt entsprechend der Drainstrom, welcher bei einer angelegten Source-Drain-Spannung fließen kann. Für Transistoren geeignete organische Halbleiter sind üblicherweise unbeabsichtigt p -dotiert. Inversion kann nur unter speziellen Bedingungen realisiert werden, welche in Ref. [36,43] analysiert wurden. Auch aus diesem Grund werden organische Transistoren in Anreicherung betrieben.

Zur Beschreibung der Kennlinien eines Dünnschicht-Transistors wird hauptsächlich das einfache Shockley-Modell herangezogen (z.B. [34,44,45]), obwohl diese Gleichungen für den in Inversion betriebenen MOSFET abgeleitet wurden. Trotzdem spiegelt diese Näherung das Kennlinienverhalten recht gut wider (siehe [46]). Demnach ist der Drainstrom I_D des Transistors durch

$$I_D = \begin{cases} \mu \frac{w}{L} C_{\text{ox}}'' [(V_{\text{GS}} - V_{\text{th}}) V_{\text{DS}} - \frac{1}{2} V_{\text{DS}}^2] & V_{\text{DS}} < V_{\text{GS}} - V_{\text{th}} \\ \mu \frac{w}{L} C_{\text{ox}}'' \frac{1}{2} (V_{\text{GS}} - V_{\text{th}})^2 & V_{\text{DS}} > V_{\text{GS}} - V_{\text{th}} \end{cases} \quad (2.1)$$

gegeben [47]. Der obere Ausdruck gilt im aktiven Bereich des Transistors, der untere im Sättigungsbereich. V_{DS} ist die Drain-Source- und V_{GS} die Gate-Source-Spannung, L und w die Kanallänge bzw. Kanalweite, μ die Beweglichkeit der Majoritätsladungsträger. Die Oxidkapazität pro Flächeneinheit $C_{\text{ox}}'' = \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{ox}} / d_{\text{ox}}$ ist gegeben durch die dielektrische Konstante und die Dicke des Gateisolators. V_{th} nennt man Schwellspannung. Bei kleinen Drainspannungen erhält man eine lineare Abhängigkeit des Stromes von V_{DS} , für $V_{\text{DS}} = V_{\text{GS}} - V_{\text{th}}$ tritt schließlich Sättigung der Ausgangskennlinien ein. Aufgrund der angelegten Drainspannung wird dann der Kanal an seinem drain-seitigen Ende an Ladungsträgern verarmt (pinch off) und ein weiteres Ansteigen des Stromes ist nicht mehr möglich. Dieser Sättigungsstrom steigt quadratisch mit der angelegten Gatespannung an. Den Bereich $V_{\text{GS}} < V_{\text{th}}$ bezeichnet man als Subthreshold-Bereich, dieser wird zweckmäßig durch eine logarithmische Auftragung der Transferkennlinien $I_D = f(V_{\text{GS}})$ bei jeweils gegebener V_{DS} dargestellt. Der Strom fällt dabei exponentiell mit abnehmender Gatespannung ab. Das Verhalten wird in diesem Bereich durch den inversen Subthreshold-Anstieg S cha-

rakterisiert, welcher durch

$$S = \frac{dV_{GS}}{d(\log I_D)} = \frac{kT}{e} \ln 10 \left(1 + \frac{C_d''}{C_{ox}''} \right) \quad (2.2)$$

gegeben [47] ist. Hierbei ist $C_d'' = \varepsilon_0 \varepsilon / l_{dep}$ die Verarmungskapazität gegeben durch die dielektrische Konstante des Halbleiters ε und die weiter unten angegebene Verarmungslänge l_{dep} . Ist, wie beim Dünnschicht-Transistor der Fall, die Verarmungslänge größer als die Dicke der aktiven Schicht, muß die Verarmungskapazität C_d'' in Gleichung (2.2) Null gesetzt werden. Der Wert von S gibt die notwendige Änderung der Gatespannung an, um den Subthreshold-Strom um eine Größenordnung zu variieren. Für einen Betrieb des Transistors bei niedrigen Spannungen sollte S so klein wie möglich sein, der ideale Wert beträgt bei Raumtemperatur $(kT/e) \ln 10 \approx 60 \text{mV/dec}$.

Abweichungen der Kennlinien vom beschriebenen Verhalten können durch Besonderheiten in den Materialeigenschaften, wie Verteilungen von Transport- und/oder Trapzuständen, Dotierung, der Natur der Kontakte oder durch Eigenheiten der Bauelementstruktur entstehen. Daher ist die funktionale Abhängigkeit von den Spannungen manchmal nur scheinbar wie in Gleichung (2.1) oder es können qualitative Unterschiede auftreten. Teils ist auch nur das Subthreshold-Verhalten modifiziert. Aus den Kennlinien extrahierte Beweglichkeiten können daher erhebliche Fehler aufweisen [48].

Die Definition der Schwellspannung V_{th} für den Dünnschicht-Transistor kann nicht einfach vom MOSFET übernommen werden, es muß vielmehr die Abhängigkeit von der Schichtdicke berücksichtigt werden. Beim MOSFET ist die Schwellspannung durch das Einsetzen der Inversion definiert. Im Dünnschicht-Transistor hingegen kann die Halbleiterschicht bereits vollständig verarmt sein, auch wenn das Oberflächenpotential ϕ_S (Potential an der Oxidgrenzfläche) noch nicht den Wert der Inversion erreicht hat. Näherungsweise ergibt sich eine modifizierte Schwellspannung für den Dünnschicht-Transistor, welche durch

$$V_{th} = V_{FB} \pm \frac{eN_{dop}d_{org}}{C_{ox}''} - 2\phi_{bulk} \left(\frac{d_{org}}{l_{dep}} \right)^2 \quad (2.3)$$

gegeben ist [49]. Das positive (negative) Vorzeichen gilt für eine Akzeptor- (Donator-) Dotierung. Die Flachband-Spannung V_{FB} ergibt sich nach

$$V_{FB} = \Phi_G - \Phi_{HL} - \frac{Q_{it}''}{C_{ox}''} \quad (2.4)$$

aus der Differenz der Austrittsarbeiten von Gatematerial Φ_G und Halbleiter Φ_{HL} sowie einer Korrektur durch möglicherweise vorhandene Grenzflächenladungen Q_{it}'' . Es ist e die Elementarladung, N_{dop} die Dotierstoffkonzentration, d_{org} die Dicke der aktiven Schicht. Für die Verarmungslänge l_{dep} gilt:

$$l_{dep} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon |\phi_S - \phi_{bulk}|}{eN_{dop}}}, \quad (2.5)$$

mit dem Wert des Potentials im Bulk-Material $\phi_{bulk} = \pm(kT/e) \ln(n_i/N_{dop})$, wobei das positive (negative) Vorzeichen für eine Akzeptor- (Donator-) Dotierung gilt und

n_i die intrinsische Ladungsträgerkonzentration ist. Das Potential ϕ ist definiert als ortsabhängiges Eigenleitungspotential, der Nullpunkt ist durch das Fermi-Potential gegeben.

Gleichung (2.3) gilt, wenn die Dicke der aktiven Schicht kleiner als die Verarmungslänge ($d_{\text{org}} < l_{\text{dep}}$) ist. Diese Bedingung muß erfüllt sein, andernfalls resultiert ein zusätzlicher ohmscher Strom in dem Teil der Schicht außerhalb der Verarmungszone. Als Konsequenz schaltet der Transistor unterhalb der Schwellspannung nicht vollständig aus und man erhält ebenfalls keine Sättigung des Stromes. Für einen Dünnschicht-Transistor sind also eine geringe Schichtdicke und eine niedrige Dotierung des Halbleiters erforderlich, da mit zunehmender Dotierstoffkonzentration die Verarmungslänge abnimmt. Für die Materialparameter von PPV und $N_{\text{dop}} = 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ergibt sich zum Beispiel $l_{\text{dep}} \approx 80 \text{nm}$. Bei unbeabsichtigt hohen Dotierungen organischer Materialien oder auch beabsichtigt hoher Dotierung müssen entsprechend Schichtdicken im Bereich von 50nm hergestellt werden.

Der gewünschte Einsatz des Transistors bei niedrigen Spannungen erfordert neben einem geringen inversen Subthreshold-Anstieg auch eine geringe Schwellspannung, wobei für ein p- (n-) Kanal Transistor ein negativer (positiver) Wert vorteilhaft ist. Nach Gleichung (2.3) wirkt dabei eine hohe Dotierung in die entgegengesetzte Richtung. Auch in dieser Hinsicht ist eine niedrige Dotierstoffkonzentration angebracht. Für hohe Dotierungen, welche für eine hohe Beweglichkeit vorteilhaft sein könnten, kann eine hohe Schwellspannung nur durch einen dünnen Isolator und eine dünne aktive Schicht verhindert werden. Unbeabsichtigt vorhandene Grenzflächenladungen wirken sich bei dünnen Isolatoren ebenfalls weit weniger stark auf eine Schwellspannungsverschiebung aus. Die Dicke des Gateisolators ist also entscheidend, nur bei einer geringen Schichtdicke kann der Transistor bei niedrigen Spannungen (bis 10V) betrieben werden.

Für Anwendungen müssen weiterhin minimale Anforderungen an die Schaltgeschwindigkeit der Transistoren gestellt werden. Diese wird durch die cut-off Frequenz $f_0 = g_m / (2\pi C_{\text{GS}})$ bestimmt, bei welcher die Spannungsverstärkung Eins wird. Die Steilheit $g_m = \partial I_{\text{D}} / \partial V_{\text{GS}}$ ergibt sich aus Gleichung (2.1), ihr Maximalwert wird bei $V_{\text{DS}} = V_{\text{GS}} - V_{\text{th}}$ (pinch off) erreicht. Die Gate-Source-Kapazität C_{GS} ist aufgrund parasitärer Kapazitäten stets größer als die Isolatorkapazität, also $C_{\text{GS}} \geq C_{\text{ox}}'' wL$. Daraus ergibt sich mit

$$f_0 \leq \frac{1}{2\pi} \frac{\mu}{L^2} (V_{\text{GS}} - V_{\text{th}}) \quad (2.6)$$

ein oberer Grenzwert. Für Anwendungen ist eine Grenzfrequenz von mindestens 100kHz erforderlich [32, 46]. Bei Spannungen von höchstens 10V und realistisch hohen Beweglichkeiten von $0.01 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ sind dann Kanallängen unterhalb von $4 \mu\text{m}$ nötig. Allerdings können parasitäre Kapazitäten nie vollständig vermieden werden, somit sind also eher Kanallängen im Submikrometer-Bereich erforderlich. Bei derzeitigen organischen Transistoren, welche mit low-cost Techniken präpariert wurden, liegen die Beweglichkeiten gewöhnlich im Bereich von $10^{-4} \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$. Mittels gering auflösender Lithographie werden Kanallängen von $\geq 2 \mu\text{m}$ erreicht, mit bisherigen Drucktechniken sind dagegen nur Kanallängen von $\geq 20 \mu\text{m}$ realisierbar. Somit weisen diese Transistoren noch nicht die erforderlichen Grenzfrequenzen auf. Zum Vergleich, bei einem Si-MOSFET ergibt sich mit $\mu = 450 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$, $L = 130 \text{nm}$, betrieben bei 3V eine Grenzfrequenz von $f_0 < 1 \text{THz}$.

Kapitel 3

Theoretische Grundlagen

3.1 Bauelementesimulation (Drift - Diffusions - Modell)

Das Drift-Diffusions-Modell ist das einfachste und am meisten verwendete Modell zur Simulation von Halbleiterbauelementen. Thermoelektrische Effekte oder Effekte durch heiße Ladungsträger können damit nicht beschrieben werden. Eine entsprechende Erweiterung ist das Energie-Transport-Modell, es muß bei MOS-Bauelementen mit sehr kleinen aktiven Gebieten (Kanallängen kleiner 100nm) berücksichtigt werden. Zur Simulation organischer Transistoren genügt die Verwendung des einfacheren Modells.

Halbleiterbauelemente werden mittels der sogenannten Halbleiter- Grundgleichungen beschrieben. Diese Beziehungen können aus den Maxwellschen Gleichungen abgeleitet werden. Dazu gehört zum einen die Poissongleichung

$$\operatorname{div} (\varepsilon\varepsilon_0 \cdot \operatorname{grad} \phi) = -\rho, \quad (3.1)$$

welche das elektrostatische Potential ϕ mit der Ladungsdichte ρ im Halbleiter verknüpft. Es genügt dabei die Verwendung der zeitunabhängigen Poissongleichung. Diese Näherung kann auch noch bei Frequenzen f verwendet werden, welche die Bedingung $f \ll 1/(a/c)$ erfüllen. Dabei gibt a die Ausdehnung des Bauelements an und c ist die Lichtgeschwindigkeit. Für $a = 1\mu\text{m}$ erhält man $1/(a/c) = 3 \times 10^{14}\text{Hz}$. Somit lassen sich also auch Hochfrequenz-Bauelemente mit Gleichung (3.1) beschreiben. Zum anderen erhält man die Kontinuitätsgleichung

$$\operatorname{div} \vec{j}_c + \frac{\partial}{\partial t} \rho = 0, \quad (3.2)$$

sie ist letztlich Ausdruck der Ladungserhaltung. Letztere wird in zwei Gleichungen aufgespalten, um separate Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher zu erhalten:

$$\operatorname{div} \vec{j}_n - e \frac{\partial}{\partial t} n = eR \quad (3.2a)$$

und

$$\operatorname{div} \vec{j}_p + e \frac{\partial}{\partial t} p = -eR. \quad (3.2b)$$

Dabei ist die Summe aus Elektronen- und Lochstrom gleich dem Leitungsstrom (Gesamtstrom) $\vec{j}_n + \vec{j}_p = \vec{j}_c$, e ist die Elementarladung (positiv) und n bzw. p ist die Elektronen- bzw. Löcherdichte (weitere zeitabhängige Ladungsdichten vernachlässigt). Offensichtlich erhält man durch diesen formalen Schritt keine weitere Information. Durch Einführung der Größe R ist jedoch die Beschreibung einer Nettorekombination oder -generation von Elektronen und Löchern möglich, wobei positive R Rekombination und negative R Generation von Ladungsträgern bedeutet. Die Kenntnis dieser Gleichungen allein genügt jedoch noch nicht. Im folgenden sollen alle weiteren wichtigen Beziehungen angegeben werden, welche für die vorliegende Arbeit relevant sind.

Zunächst benötigt man Ausdrücke für die Ladungsträgerkonzentrationen. Diese ergeben sich ganz allgemein aus der Zustandsdichte für Elektronen im Leitungsband D_C und für Löcher im Valenzband D_V als Integral über die Energie E nach

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} D_C(E) f(E) dE \quad (3.3)$$

und

$$p = \int_{-\infty}^{\infty} D_V(E) [1 - f(E)] dE. \quad (3.4)$$

Dabei ist

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (3.5)$$

die Fermi-Verteilungsfunktion mit der Fermi-Energie E_F , E_C und E_V ist die Leitungs- bzw. Valenzbandkante. Mit k wird die Boltzmannkonstante und mit T die absolute Temperatur bezeichnet. Setzt man Nichtentartung des Halbleiters voraus, kann die Fermi-Verteilung (3.5) durch die Maxwell-Boltzmann-Verteilung genähert werden und aus Gleichungen (3.3) und (3.4) ergibt sich für die Ladungsträgerdichten:

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{kT}\right) = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{kT}\right), \quad (3.6)$$

$$p = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{kT}\right) = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{kT}\right). \quad (3.7)$$

N_C und N_V sind die effektiven Zustandsdichten (eigentlich eine Dichte, Einheit cm^{-3}) im Leitungs- und Valenzband und werden nach

$$N_C = \int_{-\infty}^{\infty} D_C(E) \exp\left(\frac{E_C - E}{kT}\right) dE, \quad (3.8)$$

$$N_V = \int_{-\infty}^{\infty} D_V(E) \exp\left(\frac{E - E_V}{kT}\right) dE. \quad (3.9)$$

direkt aus der gegebenen Zustandsdichte im Leitungs- bzw. Valenzband berechnet. Die intrinsische Ladungsträgerdichte

$$n_i = \sqrt{N_V N_C} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (3.10)$$

ist mit der Bandlücke E_g und den effektiven Zustandsdichten N_V und N_C verknüpft. E_i ist das intrinsische Energie-Niveau. Die Ladungsträgerdichten nach Gleichungen (3.6) und (3.7) gelten im Gleichgewicht, nur dann ist eine konstante Fermi-Energie definiert. Man kann die Beziehungen jedoch auch im Nichtgleichgewicht verwenden, wenn man separate Quasi-Ferminiveaus für Elektronen und für Löcher einführt. Dies nennt man auch Näherung des lokalen thermischen Gleichgewichts. Damit lassen sich die Ladungsträgerdichten durch das Potential ϕ und das Quasi-Fermi-Potential für Elektronen ϕ_{F_n} bzw. das Quasi-Fermi-Potential für Löcher ϕ_{F_p} ausdrücken:

$$n = n_i \exp\left(\frac{e(\phi - \phi_{F_n})}{kT}\right), \quad (3.11)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{e(\phi_{F_p} - \phi)}{kT}\right). \quad (3.12)$$

Das Potential ϕ ist definiert als ortsabhängiges Eigenleitungspotential: $E_i = -e\phi$, wobei der Nullpunkt durch das Fermi-Potential festgelegt wird. Liegt ein dotierter Halbleiter vor, so müssen in der Poissongleichung (3.1) auch die vollständig ionisierten negativen Akzeptoren N_A^- und/oder positiven Donatoren N_D^+ berücksichtigt werden. Unvollständige Ionisation wird nicht betrachtet. Die relative Lage der Fermi-Energie E_F im Gleichgewicht ($-E_F/e = \phi_F = \phi_{F_n} = \phi_{F_p}$) und damit auch die Elektronen- und Lochkonzentration im Gleichgewicht werden durch die Bedingung der Ladungsneutralität bestimmt: $\rho = e(p - n + N_D^+ - N_A^-) = 0$. In gleicher Weise müssen auch fixierte Ladungen wie zum Beispiel Grenzflächenladungen berücksichtigt werden. In der gesamten Ladungsdichte tritt ein zusätzlicher Term der Art $Q''_{it}\delta(y - y_0)$ auf, wenn sich an der Stelle $y = y_0$ die Flächenladungen Q''_{it} befinden.

Die Stromdichten berechnen sich nach dem Drift-Diffusions-Modell aus:

$$\vec{j}_n = en\mu_n\vec{E} + eD_n\text{grad}n = en\mu_n(-\text{grad}\phi_{F_n}) \quad (3.13)$$

und

$$\vec{j}_p = ep\mu_p\vec{E} - eD_p\text{grad}p = ep\mu_p(-\text{grad}\phi_{F_p}). \quad (3.14)$$

Diese Stromdichtegleichungen kann man für den kristallinen Halbleiter mit Hilfe der Boltzmann-Transportgleichung ableiten. Sie können jedoch auch als phänomenologische Gleichungen aufgefaßt werden und sind somit für ungeordnete Materialien gleichermaßen zutreffend. Der Strom ergibt sich demnach aus der Summe einer Driftkomponente proportional zum elektrischen Feld $\vec{E} = -\text{grad}\phi$ und einer Diffusionskomponente proportional zum Gradienten der Ladungsdichte. Die Diffusionskonstanten D_n und D_p sind über die (nicht-entarteten) Einsteinbeziehungen

$$D_n = \mu_n \frac{kT}{e} \quad (3.15)$$

und

$$D_p = \mu_p \frac{kT}{e} \quad (3.16)$$

mit der Beweglichkeit verknüpft. Mit diesen Beziehungen lassen sich die Stromdichten auch durch den Gradienten des Quasi-Ferminiveaus der Elektronen ϕ_{F_n} bzw. Löcher ϕ_{F_p} ausdrücken.

Im allgemeinen genügt eine Beschreibung im Rahmen der Nicht-Entartung. Entartung tritt innerhalb eines Bauelementes höchstens in Anreicherungsschichten auf, welche jedoch innerhalb weniger Nanometer abklingen. Ihr Auftreten ist somit auf Bereiche mit sehr geringer Ausdehnung beschränkt und der Einfluß auf Kennlinien kann vernachlässigt werden.

Für die Ladungsträgerbeweglichkeit existieren unterschiedliche Modelle, welche die Abhängigkeiten von verschiedenen Parametern berücksichtigen. In der vorliegenden Arbeit wird stets vom einfachsten Modell einer konstanten Beweglichkeit der Ladungsträger ausgegangen. Da im Rahmen der Arbeit nur Rechnungen bei Raumtemperatur durchgeführt werden, muß auch keine Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit spezifiziert werden.

Weiterhin wird noch ein Modell für die Generation und die Rekombination von Ladungsträgern benötigt, es müssen also Aussagen über die in den Gleichungen (3.2a) und (3.2b) eingeführte Größe R getroffen werden. Im allgemeinen sind mehrere verschiedene Prozesse bekannt, so dass R gewöhnlich als Summe verschiedener Raten geschrieben wird. Wechselwirkungsphänomene zwischen verschiedenen Mechanismen werden somit in Simulationsprogrammen bisher völlig ignoriert. Jedoch sind oftmals nicht alle Prozesse relevant. Für organische Materialien und die bisher in der organischen Elektronik realisierten Abmessungen der Bauelemente können Prozesse wie Auger-Rekombination oder Stoßionisation vernachlässigt werden. So sind im Rahmen dieser Arbeit nur zwei Prozesse von Bedeutung. Dies ist zum einen die direkte (Band-Band-)Rekombination (Photonen-Übergang). Sie ist beim double-injection- (ambipolar-) Feldeffekt-Transistor von Bedeutung. Die Rekombinationsrate ist mit

$$R_{\text{direkt}} = r (np - n_i^2) \quad (3.17)$$

gegeben, wobei r der Rekombinationskoeffizient ist. Liegt Langevin Rekombination vor, was in organischen Systemen mit niedriger Beweglichkeit der Fall ist, so gilt:

$$r = r_L = \frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} (\mu_n + \mu_p). \quad (3.18)$$

Der zweite Mechanismus ist die Shockley-Read-Hall Rekombination (indirekte Rekombination, Phononen-Übergang). Dieser ist in unipolaren Bauelementen gewöhnlich vernachlässigbar. Er ist jedoch in MOS-Kondensatoren bei der Ausbildung der Inversionsschicht von Bedeutung, da die Inversionsladungen im Regelfall durch Generation erzeugt werden müssen. Die Rekombinationsrate ist gegeben durch:

$$R_{\text{SRH}} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p (n + n_1) + \tau_n (p + p_1)}. \quad (3.19)$$

Dabei gilt

$$n_1 = n_i \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT}\right), \quad (3.20)$$

$$p_1 = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT}\right) \quad (3.21)$$

und $\tau_n = 1/\sigma_n v_{\text{th}}^n N_t$, $\tau_p = 1/\sigma_p v_{\text{th}}^p N_t$ sind die Minoritätsladungsträger-Lebensdauern von Elektronen bzw. Löchern, E_i das intrinsische Energieniveau und $v_{\text{th}}^n = v_{\text{th}}^p = v_{\text{th}}$

die thermische Geschwindigkeit, welche im Rahmen dieser Arbeit stets für Elektronen und Löcher als gleich angenommen wird. N_t , E_t , σ_n und σ_p sind die Konzentration, energetische Lage bzw. der Wirkungsquerschnitt für Elektronen und Löcher des Trapniveaus, welches als Rekombinationszentrum wirkt. Dieser Prozess ist am effektivsten für Niveaus in der Mitte der Bandlücke. Daher wird bei Berücksichtigung der SRH-Rekombination gewöhnlich ein Niveau mit $E_t = E_i$ angenommen. Der SRH-Ausdruck (3.19) gilt jedoch nur im stationären Fall (ungleich des thermodynamischen Gleichgewichtes). Im zeitabhängigen Fall können sich die Konzentrationen sehr schnell ändern und insbesondere variiert auch die Besetzung des Trapniveaus (Rekombinationszentrums). Daher erhält man unterschiedliche Raten für Elektronen und Löcher, wobei gilt:

$$R_{\text{SRH}}^n = \sigma_n v_{\text{th}}^n N_t [n(1 - f_n) - n_1 f_n] \quad (3.22)$$

und

$$R_{\text{SRH}}^p = \sigma_p v_{\text{th}}^p N_t [p f_n - p_1(1 - f_n)]. \quad (3.23)$$

R_{SRH}^n muß in der Kontinuitätsgleichung für Elektronen und entsprechend R_{SRH}^p in der für Löcher berücksichtigt werden. Die (Elektronen-) Besetzungsfunktion wird mit f_n bezeichnet. Der erste Term in Gleichung (3.22) (Gleichung (3.23)) entspricht der Einfangrate für Elektronen (Löcher) durch das Rekombinationszentrum, welche proportional zur Wahrscheinlichkeit ist, dass dieses Niveau unbesetzt (besetzt) ist. Der zweite Term entspricht der Emissionsrate für Elektronen (Löcher), welche entsprechend proportional zur Wahrscheinlichkeit ist, dass das Trapniveau besetzt (unbesetzt) ist. Aus der Differenz beider Raten ergibt sich die Änderung der Besetzung des Niveaus

$$N_t \frac{df_n}{dt} = R_{\text{SRH}}^n - R_{\text{SRH}}^p \quad (3.24)$$

bzw. mit Gleichungen (3.22) und (3.23) erhält man die Beziehung

$$\frac{df_n}{dt} = \sigma_n v_{\text{th}}^n n(1 - f_n) - \sigma_n v_{\text{th}}^n n_1 f_n - \sigma_p v_{\text{th}}^p p f_n + \sigma_p v_{\text{th}}^p p_1(1 - f_n). \quad (3.24')$$

Diese Trapratengleichung muß selbstkonsistent mit der Poisson- und den Transportgleichungen gelöst werden. Im stationären Fall hingegen erhält man aus der Bedingung $R_{\text{SRH}}^n = R_{\text{SRH}}^p$ bzw. $df_n/dt = 0$ für die (Elektronen-) Besetzungsfunktion

$$f_n = \frac{\sigma_n v_{\text{th}}^n n + \sigma_p v_{\text{th}}^p p_1}{\sigma_n v_{\text{th}}^n (n + n_1) + \sigma_p v_{\text{th}}^p (p + p_1)} \quad (3.25)$$

und daraus direkt den bekannten Ausdruck (3.19) für die Shockley-Read-Hall Rekombinationsrate. Werden zusätzlich Trapzustände berücksichtigt, müssen die Raten R_{SRH}^n und R_{SRH}^p (bzw. R_{SRH} im stationären Fall) über alle Niveaus summiert werden und die Trapratengleichung (3.24') muß für jedes Niveau separat gelöst werden, um die jeweilige Besetzungsfunktion im zeitabhängigen Fall zu berechnen.

Die Besetzung beliebiger Trapzustände im Material wird also ebenfalls durch die Gleichungen (3.22), (3.23) sowie die Trapratengleichung (3.24) vollständig beschrieben. Als effektive Rekombinationszentren wirken sie jedoch nur, wenn sie nahe der Mitte der Bandlücke liegen. Ist dies nicht der Fall, so lassen sich geeignete Näherungen angeben. Liegt das Trapniveau einige kT oberhalb des intrinsischen Niveaus

und gilt dies zusätzlich ebenfalls für das Quasi-Ferminiveau, so ist dann die Netto Elektronen-Einfangrate durch $R_{\text{SRH}}^{\text{n}}$ (Gleichung (3.22)) gegeben und $R_{\text{SRH}}^{\text{p}}$ kann vernachlässigt werden. Im statischen Fall vereinfacht sich der Ausdruck (3.25) zu

$$f_{\text{n}} \rightarrow \frac{1}{1 + \exp \left\{ -e(\phi + (E_{\text{i}} - E_{\text{t}})/e - \phi_{\text{Fn}})/kT \right\}}. \quad (3.26)$$

Befindet sich das Quasi-Ferminiveau unterhalb des intrinsischen Niveaus gilt für die Elektronen-Besetzungsfunktion $f_{\text{n}} = 0$, d.h. die Traps sind unbesetzt. Liegt das Trapniveau hingegen einige kT unterhalb des intrinsischen Niveaus und gilt dies zusätzlich auch für das Quasi-Ferminiveau, dann ist die Netto Loch-Einfangrate durch $R_{\text{SRH}}^{\text{p}}$ (Gleichung (3.23)) gegeben und $R_{\text{SRH}}^{\text{n}}$ kann vernachlässigt werden. Aus Gleichung (3.25) und der Beziehung

$$f_{\text{p}} = 1 - f_{\text{n}} \quad (3.27)$$

erhält man entsprechend für die Loch-Besetzungsfunktion im statischen Fall

$$f_{\text{p}} \rightarrow \frac{1}{1 + \exp \left\{ e(\phi + (E_{\text{i}} - E_{\text{t}})/e - \phi_{\text{Fp}})/kT \right\}}. \quad (3.28)$$

Befindet sich das Quasi-Ferminiveau jedoch oberhalb des intrinsischen Niveaus gilt dann für die Loch-Besetzungsfunktion $f_{\text{p}} = 0$, d.h. die Traps sind besetzt ($f_{\text{n}} = 1$).

Im Rahmen dieser Arbeit werden akzeptorartige (elektrisch äquivalent zu neutralen Elektronentraps) und donatorartige (elektrisch äquivalent zu neutralen Lochtraps) Trapzustände berücksichtigt. Im Falle einer Trapverteilung wird die Bandlücke in geeigneter Weise in Intervalle unterteilt, welche eine Verteilung diskreter Zustände definieren. Die entsprechenden Konzentrationen N_{at} bzw. N_{dt} eines jeden Niveaus werden als Integrale über die jeweiligen Intervalle berechnet. Die getrapten negativen und positiven Ladungen müssen in der Poissongleichung berücksichtigt werden, wobei folglich eine Summation über all diese diskreten Trapniveaus erscheint. Die Nettokonzentration für ein diskretes Niveau steht folgendermaßen mit der Besetzungsfunktion für Löcher f_{p} und Elektronen f_{n} in Beziehung:

$$\mathcal{P}_{\text{t}} \equiv N_{\text{dt}} - n_{\text{dt}} = N_{\text{dt}} f_{\text{p}}, \quad (3.29)$$

$$\mathcal{N}_{\text{t}} \equiv N_{\text{at}} - p_{\text{at}} = N_{\text{at}} f_{\text{n}}. \quad (3.30)$$

Die Dichte der getrapten positiven Ladungen \mathcal{P}_{t} eines Trapniveaus ergibt sich also aus der Differenz der donatorartigen Trapkonzentration N_{dt} eines diskreten Levels und der durch dieses Niveau getrapten Elektronendichte n_{dt} . Entsprechend erhält man die Dichte der getrapten negativen Ladungen \mathcal{N}_{t} eines Trapniveaus aus der Differenz der akzeptorartigen Trapkonzentration N_{at} und der durch dieses Niveau getrapten Lochdichte p_{at} .

Zusammenfassend ergibt sich also folgendes Gleichungssystem, welches bei zeit-

abhängigen Rechnungen selbstkonsistent gelöst werden muß :

$$\begin{aligned} \nabla \varepsilon \varepsilon_0 (-\nabla \phi) = & e \left(p - n + N_D^+ - N_A^- \pm \frac{Q_{it}''}{e} \delta(y - y_0) \right) \\ & + e \left(\sum_{E_t} (N_{dt} - n_{dt}) - \sum_{E_t} (N_{at} - p_{at}) \right), \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\nabla \vec{j}_n = \nabla e n \mu_n (-\nabla \phi_{F_n}) = +e \frac{\partial}{\partial t} n + e \left(R_{\text{direkt}} + \sum_{E_t} R_{\text{SRH}}^n \right), \quad (3.32)$$

$$\nabla \vec{j}_p = \nabla e p \mu_p (-\nabla \phi_{F_p}) = -e \frac{\partial}{\partial t} p - e \left(R_{\text{direkt}} + \sum_{E_t} R_{\text{SRH}}^p \right), \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_n^{(E_t)}}{dt} = & \sigma_n v_{\text{th}}^n [n (1 - f_n^{(E_t)}) - n_1 f_n^{(E_t)}] \\ & - \sigma_p v_{\text{th}}^p [p f_n^{(E_t)} - p_1 (1 - f_n^{(E_t)})]. \end{aligned} \quad (3.34)$$

In der Poissongleichung (3.31) treten neben den frei beweglichen Ladungsträgern n und p weitere Ladungen auf, welche von einer möglicherweise vorhandenen Grunddotierung, positiven oder negativen Grenzflächenladungen oder von geladenen Trapzuständen her rühren. Letztere sind dabei abhängig von der aktuellen Trapbesetzung des jeweiligen Niveaus. In den Kontinuitätsgleichungen (3.32) und (3.33) tritt jeweils die gleiche Rate für direkte Rekombination mit unterschiedlichem Vorzeichen auf. Im Fall der Shockley-Read-Hall Rekombination hingegen können die Raten für Elektronen und Löcher im allgemeinen unterschiedlich sein, da sich die Besetzung des beteiligten Trapniveaus ändern kann. Die einzelnen Raten müssen dabei über alle Trapniveaus summiert werden. Jedoch nur Traps in der Nähe des intrinsischen Niveaus wirken als effektive Rekombinationszentren. Für Niveaus mit einem Abstand größer als einige kT kann eine der beiden Raten vernachlässigt werden. Die verbleibende, R_{SRH}^n bzw. R_{SRH}^p , beschreibt dann die Netto Elektronen- bzw. Loch-Einfangrate. Zusätzlich muß bei vorhandenen Trapzuständen für jedes Niveau einzeln die Trapratengleichung (3.34) gelöst werden.

Im stationären Fall vereinfacht sich das Gleichungssystem. Die Besetzung der einzelnen Trapzustände ändert sich zeitlich nicht, es gilt also $df_n^{(E_t)}/dt = 0$. Die stationäre Besetzungsfunktion eines jeden Niveaus ergibt sich dann aus Gleichung (3.25). Dementsprechend sind neben den frei beweglichen Ladungsträgern auch die getrappten positiven und negativen Ladungen nicht mehr zeitabhängig. Also verschwinden auch die Netto Elektronen- bzw. Loch-Einfangraten der Trapzustände. Es müssen jedoch weiterhin die Zustände in der Nähe der Mitte der Bandlücke berücksichtigt werden, welche als Rekombinationszentren wirken. Für diese gilt im stationären Fall $R_{\text{SRH}}^n = R_{\text{SRH}}^p = R_{\text{SRH}}$, wobei über alle effektiven Rekombinationszentren i summiert

wird. Im stationären Fall erhält man demzufolge:

$$\begin{aligned} \nabla \varepsilon \varepsilon_0 (-\nabla \phi) = & e \left(p - n + N_D^+ - N_A^- \pm \frac{Q_{it}''}{e} \delta(y - y_0) \right) \\ & + e \left(\sum_{E_t} (N_{dt} - n_{dt}) - \sum_{E_t} (N_{at} - p_{at}) \right), \end{aligned} \quad (3.31')$$

$$\nabla \vec{j}_n = \nabla e n \mu_n (-\nabla \phi_{F_n}) = +e \left(R_{\text{direkt}} + \sum_i R_{\text{SRH}} \right), \quad (3.32')$$

$$\nabla \vec{j}_p = \nabla e p \mu_p (-\nabla \phi_{F_p}) = -e \left(R_{\text{direkt}} + \sum_i R_{\text{SRH}} \right), \quad (3.33')$$

$$f_n^{(E_t)} = \frac{\sigma_n v_{\text{th}}^n n + \sigma_p v_{\text{th}}^p p_1}{\sigma_n v_{\text{th}}^n (n + n_1) + \sigma_p v_{\text{th}}^p (p + p_1)}. \quad (3.34')$$

Als Satz unabhängiger Variablen könnte zum Beispiel (ϕ, n, p) oder (ϕ, ϕ_n, ϕ_p) gewählt werden.

Zur Lösung des Systems aus partiellen Differentialgleichungen wurde das zwei-dimensionale Bauelemente-Simulationsprogramm ISE-TCAD [50] verwendet, speziell der Simulator DESSIS. Zunächst muß die Bauelementgeometrie vorgegeben werden, diese repräsentiert das Gebiet, auf dem die Gleichungen gelöst werden und entspricht einem vereinfachten Querschnitt des realen Bauelementes. Weiterhin ist die Angabe von Randbedingungen erforderlich. Für Neutralkontakte (ohmsche Kontakte) wird Ladungsneutralität und Gleichgewicht an der Elektrode angenommen (keine Bandverbiegung am Kontakt). D.h. also $\rho = 0$ und $np = n_i^2$, man erhält:

$$\begin{aligned} \phi &= V_a + \phi_{\text{bulk}}, \\ n &= n_0, \\ p &= p_0. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Die Ladungsträgerdichten entsprechen also den Gleichgewichtswerten n_0 bzw. p_0 im Bulk-Material und das Potential ergibt sich aus der Summe der am Kontakt angelegten Spannung V_a und dem Wert des Potentials im Bulk-Material ϕ_{bulk} . Für einen Schottky-Kontakt gelten folgende Randbedingungen:

$$\begin{aligned} \phi &= V_a - \phi_B + \frac{kT}{e} \ln \left(\frac{N_C}{n_i} \right), \\ \vec{j}_n \vec{n} &= -e \nu_n (n - n^0), \\ \vec{j}_p \vec{n} &= e \nu_p (p - p^0). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Dabei entspricht $\phi_B = \Phi_M - \chi$ der Barriere für Elektronen, d.h. der Differenz zwischen Austrittsarbeit des Kontaktmaterials und der Elektronenaffinität des Halbleiters, ν_n und ν_p sind die thermionischen Rekombinationsgeschwindigkeiten für Elektronen und Löcher. n^0, p^0 entsprechen den Gleichgewichtsdichten entsprechend dem Potential am Kontakt bei $V_a = 0$, da Ladungsneutralität nicht gefordert ist, unterscheiden sie sich im allgemeinen von n_0, p_0 . \vec{n} ist der Normalen-Einheitsvektor der

Kontaktfläche. Für die Randbedingung am Gatekontakt (Kontakt zu einem Isolator) gilt:

$$\begin{aligned}\phi &= V_a - \phi_{\text{MS}}, \\ \vec{j}_n \vec{n} &= 0, \\ \vec{j}_p \vec{n} &= 0.\end{aligned}\tag{3.37}$$

Hier ist $\phi_{\text{MS}} = \Phi_{\text{M}} - \Phi_{\text{IHL}}$ die Differenz der Austrittsarbeiten zwischen Metall und Halbleiter relativ zum intrinsischen Halbleiter (Potential definiert bezüglich des intrinsischen Niveaus). Außerdem fließt kein Strom über den Gatekontakt, d.h. es wird keine Oberflächenrekombination an der Isolatorgrenzfläche und es werden keine Modelle für Gateströme (z.B. Fowler-Nordheim) berücksichtigt. Für alle anderen Grenzflächen gelten ideale Neumann-Randbedingungen:

$$\begin{aligned}\vec{E} \vec{n} &= 0, \\ \vec{j}_n \vec{n} &= 0, \\ \vec{j}_p \vec{n} &= 0.\end{aligned}\tag{3.38}$$

Die zur Simulation notwendige Diskretisierung der partiellen Differentialgleichungen basiert auf der Methode der Box-Diskretisierung. Details findet man zum Beispiel in Ref. [51], [52] und [53]. Das Gitternetz wird dabei automatisch unter Verwendung des Gittergenerators MESH erzeugt. Die Dichte des Gitters kann durch Vorgabe einer maximalen und minimalen Elementhöhe und -weite variiert und in unterschiedlichen Gebieten des Bauelementes verschieden gewählt werden. So wird das Gitter zum Beispiel im Kanalbereich eines Transistors oder in der Nähe von Kontakten sehr fein gewählt, im Bereich des Gateisolators genügt eine grobe Diskretisierung. Die numerische Lösung des nichtlinearen Systems geschieht mittels (modifiziertem) Newton-Verfahren, Details findet man in [54].

Zum Abschluß dieses Abschnittes soll noch auf weiterführende Literatur verwiesen werden. Einen allgemeinen Überblick über die Simulation von Halbleiterbauelementen findet man in [55], über Halbleiterphysik in [56] und über MOS-Bauelemente in [47], [57], [58] und [59].

3.2 Anwendbarkeit auf organische Materialien

Der zugrunde liegende Transportmechanismus ist in anorganischen und organischen Materialien in der Regel unterschiedlich. Während bei ersteren Bandleitung vorliegt, ist die Beweglichkeit der Ladungsträger in den hier interessierenden nicht kristallinen organischen Materialien gewöhnlich kleiner als $1\text{cm}^2/\text{Vs}$ und somit liegt Hopping-Transport vor. Die Beweglichkeit ist dabei nur als Mittelwert definiert, d.h. durch das Verhältnis aus Leitfähigkeit und Ladungsträgerdichte: $\mu_n = \sigma_n/en$ bzw. $\mu_p = \sigma_p/ep$. Zur Anwendung der Standard-Bauelementesimulation auf organische Materialien sollen daher im folgenden einige Details diskutiert werden. Die Poissongleichung (3.1) sowie die Kontinuitätsgleichungen für Elektronen (3.2a) und Löcher (3.2b) sind grundlegende Beziehungen deren Gültigkeit offensichtlich ist. Ebenso sind die Stromdichtegleichungen für Elektronen (3.13) und Löcher (3.14)

vom Transportmechanismus unabhängig und auch für Hopping-Leitung gültig. Diese Gleichungen können auch als phänomenologische Beziehungen aufgefaßt werden. Man nimmt nur an, dass der Transport linear zum Gradienten des Quasi-Fermipotentials ist, bzw. einen Driftstrom proportional zum elektrischen Feld (Gradient des Potentials) und einen Diffusionsstrom proportional zum Gradient der Ladungsträgerkonzentration. Gleichfalls allgemeingültig ist die Trapratengleichung (3.24).

Die einzige Größe, welche für organische Materialien genauer betrachtet werden muß, sind die durch Gleichungen (3.6) und (3.7) definierten Ladungsträgerkonzentrationen. Es wird unterstellt, dass man das gesamte Energiespektrum unterteilen kann in Trapzustände und Zustände, welche den Stromfluß tragen. Für letztere werden zwei unterschiedliche Situationen betrachtet. Im Fall eines molekularen Materials entspricht Gleichung (3.6) bzw. (3.7) gerade der Nernst-Gleichung, welche Reduktion bzw. Oxidation für niedrige Konzentrationen beschreibt. Als Bandlücke, welche in der intrinsischen Dichte (3.10) auftritt, erscheint die Differenz zwischen Reduktions- und Oxidationspotential (im Festkörper). Diese enthalten Beiträge von der Deformation der Moleküle und mögliche Entropiebeiträge im Fall mehrfacher Redox-Stellen. In Polymeren mit Polaronen (und Bipolaronen) als Ladungszustände der Polymerketten ist es ähnlich. Hier entspricht die Bandlücke, welche in (3.10) zu verwenden ist, der zweifachen Polaronenbildungsenergie [60, 61]. In beiden Fällen muß statt der effektiven Zustandsdichte die Molekular- oder Monomerdichte verwendet werden, welche von der Größenordnung $N_C = N_V = 10^{21} \text{cm}^{-3}$ ist [46, 62]. Die Bandlücke ist die energetische Differenz zwischen einem Zustand mit einem zusätzlichen Elektron und einem Zustand mit einem zusätzlichen Loch, jeweils verbunden mit einer Verzerrung des Moleküls oder der Polymerkette am Ort der zusätzlichen Ladung (polaronische Zustände). Der Einfachheit wegen werden diese Zustände als Leitungs- bzw. Valenzband oder aber als niedrigstes unbesetztes Molekülorbital (LUMO) bzw. höchstes besetztes Molekülorbital (HOMO) bezeichnet. In diesem Sinne ist die Bandlücke eine Transport-Bandlücke und kann sich von der optisch bestimmten Bandlücke unterscheiden. Die Elektronenaffinität gibt gerade die Lage des LUMO relativ zum Vakuumniveau an. Eine Verteilung von Redox-Potentialen oder Polaronenbildungsenergien kann zudem durch eine Zustandsdichte charakterisiert werden. Dann ist N_C bzw. N_V wieder durch die Ausdrücke (3.8) bzw. (3.9) gegeben, wobei E_C und E_V jeweils die Position des Maximums der Verteilung ist. Für eine Breite der Verteilung klein im Vergleich zu kT erhält man für N_C und N_V die oben erwähnten Werte, für breitere Verteilungen entsprechend kleinere Werte. Die Näherung der Nichtentartung (3.6) - (3.9) kann gewöhnlich verwendet werden, wenn die Fermi-Energie in einem Bereich liegt, wo die Zustandsdichte Null ist und ihr Abstand von der Zustandsdichte ungleich Null groß im Vergleich zu kT ist. Im Fall einer exponentiellen oder einer Gaußschen Zustandsdichte muß der Abfall der Verteilung stärker sein als das Ansteigen der Fermi-Verteilung. Die Grenzen der Anwendbarkeit für die Näherung der Nichtentartung wurden in [46] für den Fall einer Gauß-Verteilung gezeigt. OFETs werden in Anreicherung und nahe der Raumtemperatur betrieben. Unter diesen Bedingungen wird gezeigt, dass die Näherung mindestens bis zu einer Breite der Gauß-Verteilung von etwa 100meV verwendet werden kann. Für wesentlich breitere Verteilungen würde die Näherung der Nichtentartung versagen. In den Simulationen wird also vorausgesetzt, dass die Ladungsträgerkonzentrationen hinreichend

gut durch Gleichungen (3.6) und (3.7) beschrieben werden.

Es soll schließlich noch die Verwendung der nicht-entarteten Einsteinbeziehungen (3.15) und (3.16) betrachtet werden. Im Feldeffekt-Transistor ist Diffusion im aktiven Bereich eher unbedeutend, da ein homogener Kanal vorliegt. Im Subthreshold-Bereich ist die Konzentration ohnehin klein genug, dass die Näherung der Nichtentartung angewendet werden kann. Beim Übergang in die Sättigung mit der typischen Kanaleinschnürung wird die Diffusion bedeutender, trotzdem ist der Einfluß auf den Strom eher gering, da in Sättigung der Strom nahezu unabhängig von der Drainspannung wird. Daher haben Abweichungen von der nicht-entarteten Einsteinbeziehung nur einen geringen Einfluß auf den FET [46].

Abschließend sollen noch einige Bemerkungen zur Beziehung zwischen Beweglichkeit, Leitfähigkeit und Dotierung in amorphen organischen Halbleitern gemacht werden. Für organische Bauelemente benötigt man Dotierungen unterhalb von $N_{\text{dop}} = 10^{18} \text{cm}^{-3}$, andernfalls werden die Abschirmrängen zu klein. In diesem Bereich wird die Reinheit der Materialien problematisch, Rückstände von Katalysatoren oder eine unbeabsichtigte Oxidation kann zu einer effektiven Dotierung führen. Tatsächlich sind die für Transistoren verwendeten Materialien meist unbeabsichtigt p-dotiert. Dabei gibt es nur wenig Information über die Konzentration wie auch über die chemische und strukturelle Natur der Dotanden. Analysiert man Kondensatoren oder Transistoren, findet man gewöhnlich Dotierungen von der Größenordnung $N_{\text{A}} = 10^{16} \text{cm}^{-3} \dots 10^{17} \text{cm}^{-3}$. Die Möglichkeit der kontrollierten niedrigen Dotierung organischer Materialien wäre wünschenswert. Allerdings steht dies für viele ungeordnete organische Materialien, welche für Anwendungen in der Elektronik interessant sind, im Widerspruch zu einer benötigten hohen Beweglichkeit. Sie bestimmt entscheidend die Grenzfrequenz des Transistors. In Ref. [48] wurde eine empirische Relation zwischen Beweglichkeit und Leitfähigkeit aufgestellt: $\mu \propto \sigma^{0.76}$, zusätzlich zu einer Abhängigkeit der Leitfähigkeit von der Konzentration der Dotanden: $\sigma \propto (N_{\text{dop}})^{4.5}$. In einer weiteren Arbeit konnten wir zeigen, dass sich diese Abhängigkeiten ergeben, wenn Mott's variable range hopping (VRH) als Transportmechanismus zugrunde liegt [E2]. Demnach begünstigt also eine hohe Dotierung die erforderliche hohe Beweglichkeit, was im Widerspruch zur erwünschten niedrigen Dotierung steht. Besonders reine Materialien zeigen oft geringe Beweglichkeiten, hohe Werte hingegen könnten teils durch die unbeabsichtigte Oxidation hervorgerufen werden. Die Beweglichkeit kann weiterhin durch eine höhere Ordnung der Schichten maßgeblich erhöht werden. Das müsste jedoch im Hinblick auf mögliche Anwendungen ebenfalls mit entsprechend preiswerten Abscheidungstechniken erzielt werden.

Eine umfangreiche Stoffsammlung zur Thematik organischer Materialien findet man zum Beispiel in [63], einführende Kapitel zu den wichtigsten Gebieten in [64]. Einen Überblick zur Theorie von Ladungsträgern in Molekülkristallen findet man in [65]. Elektrischer Transport in Festkörpern mit Bezug auf organische Halbleiter wird in [66] behandelt.

Kapitel 4

Einfluß verteilter Trapzustände auf OFET-Kennlinien

Wie bereits schon in Kapitel 2 erwähnt, weichen gemessene Strom-Spannungs-Kennlinien von OFETs oft vom konventionellen Verhalten ab [67], welches mit bisherigen Modellen [49, 68–72] beschrieben werden kann. So findet man zum Beispiel einen großen inversen Subthreshold-Anstieg als auch eine Abhängigkeit des inversen Subthreshold-Anstieges von der Drainspannung. Beides kann sich aus der Umladung von tiefen Grenzflächen- oder Bulk-Trapzuständen ergeben, wie kürzlich durch Vergleich experimenteller Daten mit zwei-dimensionalen (2D) numerischen Simulationen gezeigt worden ist [67]. Andere Eigenarten wie eine nicht-quadratische Abhängigkeit des Sättigungsstromes von der Gatespannung oder eine nicht-lineare Abhängigkeit im aktiven Bereich können mit diesem Modell nicht erklärt werden.

Es ist außerdem in einigen Fällen beobachtet worden, dass die aus den OFET-Kennlinien bestimmte Feldeffekt-Beweglichkeit kleiner ist als die intrinsische time-of-flight-Beweglichkeit. Es ist weithin bekannt, dass dieses Phänomen in Dünnschicht-Transistoren (TFT) mit amorphen Silizium (a-Si) als aktiver Schicht auftritt (oft einfach entweder als TFT-Modell oder a-Si-Modell bezeichnet) [73–77]. In diesem Modell ist ein Teil der durch das Feld induzierten Ladung in einer exponentiell abfallenden Trapverteilung in der Bandlücke gefangen. Die reduzierte Dichte an freien beweglichen Ladungen im Kanal geht formell in die Feldeffekt-Beweglichkeit ein. Aufgrund der scheinbar reduzierten (effektiven) Beweglichkeit wird dieses Modell als auf OFETs anwendbar angesehen [24, 78–82]. Tatsächlich ist jedoch bislang noch nicht überprüft worden, welche weiteren Konsequenzen aus diesen Annahmen für die Transistor-Kennlinien resultieren. Dies ist nur mittels numerischer 2D Simulationen möglich. Die Ergebnisse detaillierter Simulationen werden in diesem Kapitel diskutiert [E3, E5]. Es wird zunächst das a-Si-Modell näher erläutert und alle für die Simulationen verwendeten Parameter angegeben. Anschließend werden die Ergebnisse für OFETs der top-Kontakt- (TOC) und bottom-Kontakt- (BOC) Struktur mit einer p -Grunddotierung vorgestellt und diskutiert. Es wurde die Konzentration und die Breite der Trapverteilung variiert als auch die Source/Drain Austrittsarbeiten. Für den trap-freien Fall sind bereits in Refs. [83–86] 2D Simulationen für TOC und BOC OFETs mit unterschiedlichen Source/Drainkontakten vorgestellt worden. Es schließt sich ein erster Vergleich mit experimentellen Daten für einen OFET auf der Basis von modifizierten Poly-(Phenylen-Vinyl) (PPV) an.

4.1 a-Silizium Modell

Das a-Si- oder TFT-Modell wird zur Beschreibung von Dünnschicht-Transistoren mit amorphen Silizium als aktiver Schicht genutzt [73–77]. Es basiert auf der Verteilung von Transportzuständen und lokalisierten Zuständen in amorphen Silizium. Dementsprechend berücksichtigt das Modell die Existenz von Transportzuständen im Valenz- und Leitungsband und lokalisierte Zustände in der Bandlücke. Dabei unterscheidet man zwischen tail-Zuständen nahe den Bandkanten (Beweglichkeitskanten) und Trapzuständen. Für letztere nimmt man eine Verteilung an, die exponentiell von der Bandkante in die Bandlücke hinein abfällt. Die Zustände im oberen Teil der Bandlücke nahe dem Leitungsband (LUMO) sind akzeptorartig und die Zustände im unteren Teil nahe dem Valenzband (HOMO) sind donatorartig (gerade entgegengesetzt zu den geläufigen donatorartigen und akzeptorartigen Dotanden). Die Verteilung wird beschrieben durch die Zustandsdichte

$$D_{\text{dt/at}} = N_0 \exp \left\{ - \left| \frac{E - E_0}{E_S} \right| \right\}. \quad (4.1)$$

Hierbei entspricht E_0 der Valenzbandkante für donatorartige Traps beziehungsweise der Leitungsbandkante für akzeptorartige Traps. Mit dem gleichem Wert für die Abfallkonstante E_S für beide Trapverteilungen sind diese symmetrisch hinsichtlich der Lage von HOMO und LUMO. Tail-Zustände werden durch die gleiche funktionelle Abhängigkeit beschrieben. Folglich ist ihr Effekt grundsätzlich der gleiche wie der der Traps. Aber im Gegensatz zu den Trapzuständen fällt ihre Verteilung viel schneller ab. In Abb. 4.1 ist die Verteilung der Zustände innerhalb der Bandlücke nach dem a-Si-Modell schematisch dargestellt.

Die getrapten Ladungen tragen nicht zum elektrischen Strom im Anreicherungskanal eines Feldeffekt-Transistors bei. Als Folge wird im a-Si-Modell dieser Effekt formal beschrieben durch eine niedrigere effektive Beweglichkeit μ_{eff} , welche näherungsweise gegeben ist durch [73]

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu_0} = \frac{Q''_{\text{mob}}}{Q''_{\text{total}}} = \frac{Q''_{\text{mob}}}{(Q''_{\text{mob}} + Q''_{\text{trap}})}, \quad (4.2)$$

wobei μ_0 die wahre Beweglichkeit der beweglichen Ladungsträger ist. Q''_{total} ist die von der Gatespannung abhängige feldinduzierte Flächenladung und deren beweglicher Anteil ist Q''_{mob} , welcher ebenfalls von der Gatespannung anhängt. Abgesehen von dieser bekannten Beziehung sind weder detailliertere analytische Näherungen noch die Implementation des Modells in numerischen 2D Simulationsprogrammen [50, 77] tatsächlich auf organische Bauelemente angewandt worden.

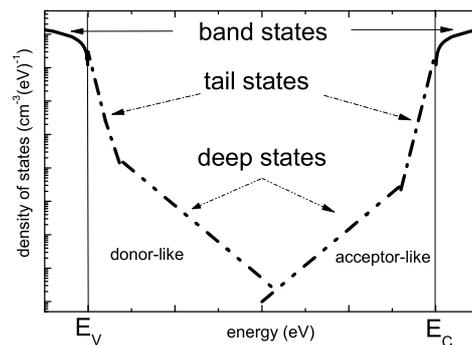


Abbildung 4.1: Zustandsdichte innerhalb der Bandlücke nach dem a-Si-Modell

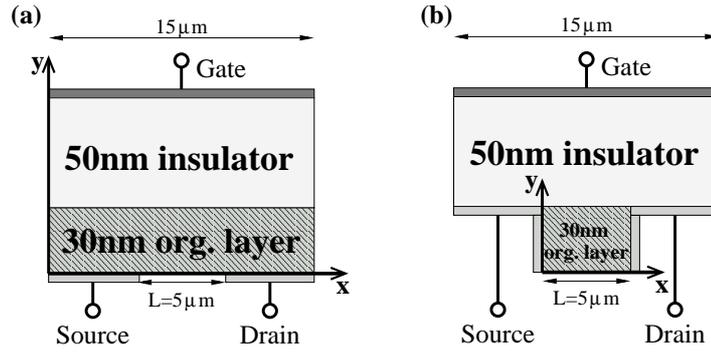


Abbildung 4.2: TOC-Struktur (a), BOC-Struktur (b).

4.2 Transistorstruktur und Materialparameter

Simulationen wurden für zwei verschiedene OFET-Strukturen durchgeführt, der top-Kontakt-Struktur (TOC) und der bottom-Kontakt-Struktur (BOC). Beide sind in der Literatur angegeben worden und werden experimentell genutzt [36, 43, 67]. Bei der top-Kontakt-Struktur (Abb. 4.2a) sind die Source- und Drainkontakte oben auf der aktiven Schicht aufgebracht. Deshalb besteht kein direkter Kontakt zwischen Source/Drain und dem durch die Gatespannung induzierten Anreicherungskanal an der Grenzfläche zwischen organischer Schicht und dem Gateisolator, was einen Serienwiderstand zur Folge hat. Bei der bottom-Kontakt-Struktur (Abb. 4.2b) grenzen Source- und Drainkontakt direkt an das Kanalgebiet der simulierten Struktur. In der Praxis ist es jedoch nicht sicher, ob der Herstellungsprozeß auch zu einer kompletten Ausfüllung der Ecken (Isolator-organische Schicht-Source/Drain) mit organischen Material führt. Bei beiden Strukturen wurde eine Kanallänge von $L = 5 \mu m$ gewählt. Für bisherige OFETs ist dies ziemlich klein [67], wenngleich es noch kein Kurzkanal-Bauelement ist (aufgrund der geringen Beweglichkeit organischer Materialien werden solche Kanallängen für eine angemessene Schaltgeschwindigkeit benötigt). Die Schichtdicke ist mit $d_{org} = 30 nm$ geringer als die Verarmungslänge (bestimmt durch die unterstellte hohe unbeabsichtigte Dotierung) und erlaubt vollständige Verarmung im Sperrzustand. Die Isolatorschichtdicke $d_{ox} = 50 nm$ ist realistisch für ein Hybrid-Bauelement auf einem Siliziumwafer mit thermischen Siliziumdioxid als Gateisolator. In den Simulationen beträgt die Kanalweite $w = 1 \mu m$. Die Gate- und Source/Drain- Materialien werden als Metalle beschrieben.

Das Gatekontaktmaterial wird allein durch seine Austrittsarbeit charakterisiert. Hierfür wurde ein Wert von 4.05eV gewählt, das entspricht einer Verwendung von $n^+ - Poly - Si$ als Kontaktmaterial. Der exakte Wert ist dabei nicht von großer Bedeutung, da nur die Flachbandspannung direkt beeinflusst wird. Wie man später noch sehen wird, ist allerdings die Austrittsarbeit der (metallischen) Source- und Drainkontakte eine entscheidende Größe. Sie ist zwischen 4.451eV und 5.0eV variiert worden, die Auswahl dieser Werte wird später noch verdeutlicht. Die Differenz zwischen dieser Metallaustrittsarbeit und der Energie der Transportzustände, d.h. χ für Elektronen und $(\chi + E_g)$ für Löcher (χ ist die Elektronenaffinität und E_g die Bandlücke), agiert als Kontaktbarriere. Eventuell auftretende Dipolschichten oder Fermi-level-pinning am Kontakt kann durch die Wahl einer korrigierten Aus-

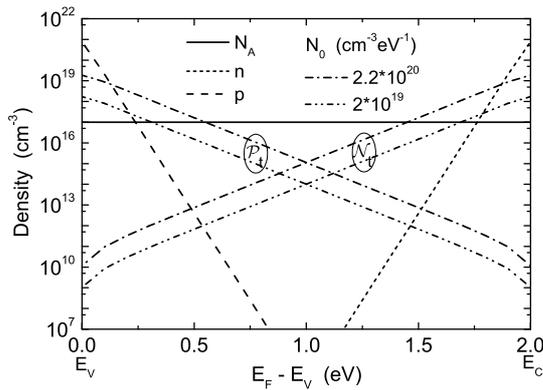


Abbildung 4.3: Dichte von Löchern, Elektronen und ionisierten Akzeptoren (p , n , N_A^-) in Abhängigkeit von der Fermi-Energie relativ zur Valenzbandkante und die Dichte der getrapten positiven und negativen Ladungen (\mathcal{P}_t , \mathcal{N}_t) für Trapparameter N_0 wie angegeben und $E_S = 0.1\text{eV}$, $T = 300\text{K}$.

trittsarbeit modelliert werden. SiO_2 mit einer relativen dielektrischen Konstante von $\varepsilon_{ox} = 3.9$ wurde als Gateisolator gewählt. Die Parameter für die aktive organische Schicht wurden wie folgt gewählt: dielektrische Konstante des organischen Materials $\varepsilon = 3.24$, Elektronenaffinität $\chi = 3.0\text{eV}$, Bandlücke $E_g = 2.0\text{eV}$, konstante Beweglichkeiten für Elektronen und Löcher $\mu_n = \mu_p = 10^{-3}\text{cm}^2/\text{Vs}$, effektive Zustandsdichten $N_C = N_V = 10^{21}\text{cm}^{-3}$ (Monomerdichte). Eine Grunddotierung der Konzentration $N_A^- = 10^{17}\text{cm}^{-3}$ wird angenommen, was die Tatsache widerspiegelt, dass für OFETs geeignete organische Materialien, speziell die modifizierten Polythiophene, gewöhnlich unbeabsichtigt p -dotiert sind (z.B. durch Oxidation, vermutlich ebenfalls durch Katalysatorreste). Alle Ergebnisse entsprechen einer Temperatur von 300K .

4.3 Simulierter Einfluß einer exponentiellen Trapverteilung

4.3.1 Exponentielle Trapverteilung

Die Besonderheiten des a-Si-Modells sind die exponentielle Trapverteilung und tail-Zustände. Letztere werden zunächst vernachlässigt. Simulationen haben gezeigt, dass ihr Einfluß im wesentlichen äquivalent einer erhöhten Konzentration der Trapverteilung ist. Wie bereits erwähnt, sind die Trapzustände donatorartig nahe der Valenzbandkante und akzeptorartig nahe der Leitungsbandkante mit einer symmetrischen Verteilung beschrieben durch die Zustandsdichte (4.1). Für die Abfallkonstante E_S wird ein Wert von 0.1eV gewählt. Bei ausgewählten Trapverteilungen wurden zusätzlich Rechnungen mit 0.05eV und 0.15eV durchgeführt. Der Maximalwert N_0 der Zustandsdichte wird im Bereich von $2 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}\text{eV}^{-1}$ bis $2.2 \cdot 10^{20}\text{cm}^{-3}(\text{eV})^{-1}$ variiert. Zum Vergleich wurden ebenfalls Rechnungen ohne Traps durchgeführt.

Für diese Parameter sind die Gleichgewichtsdichten der getrapten positiven Ladungen \mathcal{P}_t und der getrapten negativen Ladungen \mathcal{N}_t in Abb. 4.3 dargestellt als Funktion der Lage der Fermi-Energie relativ zur Valenzbandkante. Diese Dichten sind für die niedrigste und höchste Trapkonzentration gezeigt im Vergleich zu den Dichten der beweglichen Löcher p und Elektronen n zusammen mit der Konzen-

tration der ionisierten Akzeptoren N_A^- . Die tatsächliche Lage der Fermi-Energie im Bulk-Material folgt aus der Bedingung der Ladungsneutralität

$$p + \mathcal{P}_t = n + \mathcal{N}_t + N_A^- \quad (4.3)$$

und ist folglich stark beeinflusst durch die Trapverteilung. Im Fall der höheren Trapverteilung liegt die Fermi-Energie gerade am Schnittpunkt von \mathcal{P}_t und N_A^- bei $E_F - E_V = 0.549\text{eV}$. Entsprechend der Affinität beträgt für diesen Wert die Austrittsarbeit 4.451eV . Das ist gerade der oben erwähnte kleinere Wert der Source/Drain Austrittsarbeit, welcher derart gewählt wurde, damit in diesem Fall ein Neutralkontakt vorliegt. Jedoch geht die Neutralität dieses Kontaktes aus den dominierenden Lochtraps hervor, wohingegen die bewegliche Löcherkonzentration bei dieser Position der Fermi-Energie nur etwa $\approx 4.6 \times 10^{11}\text{cm}^{-3}$ beträgt. Das bedeutet, für bewegliche Löcher ist dieser Kontakt einem Verarmungskontakt ähnlich. Die größte Source/Drain Austrittsarbeit von 5eV liegt gerade in Höhe der Valenzbandkante und dieser Kontakt ist ein Anreicherungskontakt, da die Fermi-Energie im organischen Material für die gewählten Parameter stets innerhalb der Bandlücke liegt, wie in Abb. 4.3 zu sehen.

4.3.2 TOC und BOC Struktur mit unterschiedlicher Source/Drain Austrittsarbeit

Als Referenz für die Untersuchung des Einflusses exponentiell verteilter Trapzustände soll zunächst der trap-freie Fall diskutiert werden. Die Ausgangs- und Transferkennlinien sind in Abb. 4.4 für beide Transistorstrukturen und für den Fall der größeren Source/Drain Austrittsarbeit von 5.0eV gezeigt. Für diese Austrittsarbeit sind die Source/Drain Kontakte ohmisch oder, genauer gesagt, es sind Kontakte mit einer Lochanreicherung im Halbleiter. Die Strom-Spannungs-Kennlinien der beiden Bauelementstrukturen unterscheiden sich nicht voneinander. Qualitativ stimmen sie mit dem einfachen Shockley-Modell überein, d.h. der Sättigungsstrom steigt quadratisch mit der Gatespannung an und im aktiven Bereich tritt eine lineare Abhängigkeit auf. Der inverse Subthreshold-Anstieg (in der Abbildung nicht dargestellt) von 60mV/dec ist der ideale geringe Wert und unterscheidet sich nicht für die verschiedenen Strukturen.

Die entsprechenden Strom-Spannungs-Kennlinien für den Fall einer hohen Konzentration verteilter Traps ($N_0 = 2.2 \cdot 10^{20}\text{cm}^{-3}(\text{eV})^{-1}$) sind in Abb. 4.5 dargestellt. Im Vergleich zum trap-freien Fall hat man nun etwas geringere Ströme (ungefähr einen Faktor 4 bis 5) und die Schwellspannung ist zu einen größeren (negativen) Wert verschoben. Der Sättigungsstrom steigt stärker mit ansteigender Gatespannung an und es tritt wieder ein nahezu lineares Verhalten im aktiven Bereich auf. Des weiteren sind die Kennlinien der beiden Transistorstrukturen nun unterschiedlich, die TOC-Struktur weist geringfügig niedrigere Ströme auf als die BOC-Struktur. Im Subthreshold-Bereich (nicht dargestellt) treten keine Unterschiede zwischen den beiden Strukturen auf. Für den inversen Subthreshold-Anstieg unmittelbar unterhalb der Schwellspannung erhält man mit $\approx 600\text{mV/dec}$ einen viel größeren Wert. Nahe der ursprünglichen Schwellspannung im Fall ohne Traps tritt jedoch ein Übergang in die ideale trap-freie Abhängigkeit auf (ungefähr 60mV/dec). Der Strom im Subthreshold-Bereich ist nicht von der Drainspannung abhängig.

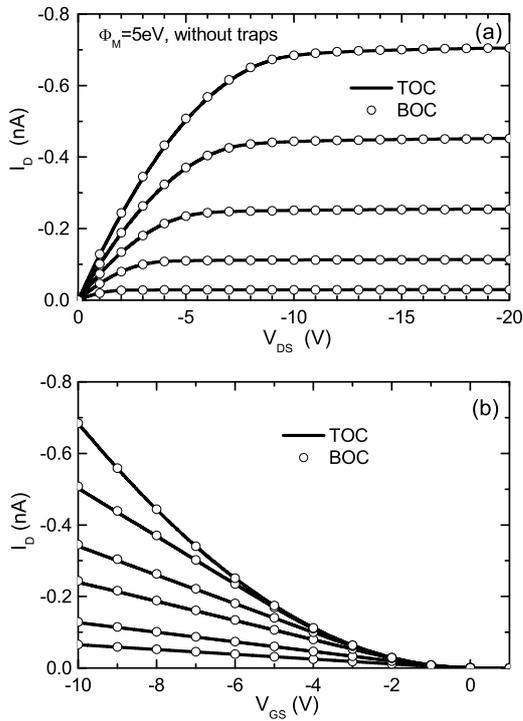


Abbildung 4.4: Ausgangskennlinien (a) (Gatespannung $-V_{GS} = 2(2)10\text{V}$, Kurzschreibweise in der Elektronik für 2, 4, 6, 8, 10V) und Transferkennlinien (b) (Drainspannung $-V_{DS} = 0.5, 1, 2, 3, 5, 10\text{V}$) für die TOC- und BOC-Struktur im Fall ohne Trapverteilung und einer Austrittsarbeit von $\Phi_M = 5.0\text{eV}$ (Anreicherungskontakt) für Source/Drain. Man beachte, dass der simulierte Strom auf $1\mu\text{m}$ Kanalweite bezogen ist.

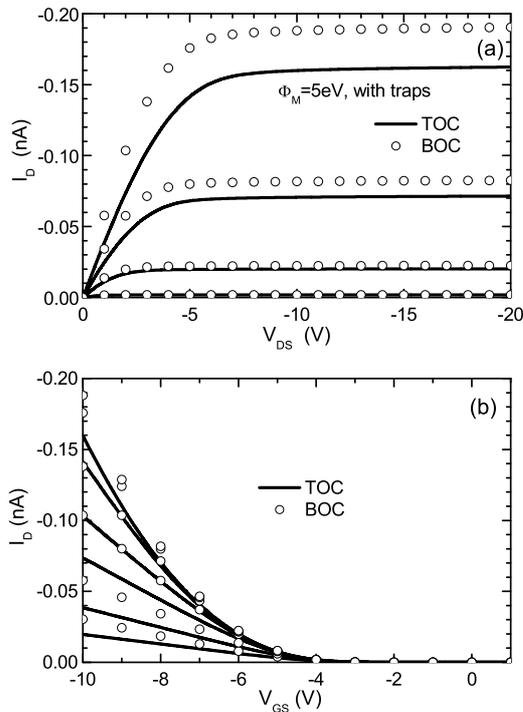


Abbildung 4.5: Ausgangskennlinien (a) (Gatespannung $-V_{GS} = 4(2)10\text{V}$) und Transferkennlinien (b) (Drainspannung $-V_{DS} = 0.5, 1, 2, 3, 5, 10\text{V}$) für die TOC- und BOC-Struktur im Fall hoher Trapkonzentration ($N_0 = 2.2 \times 10^{20}(\text{eV})^{-1}\text{cm}^{-3}$, $E_S = 0.1\text{eV}$) und der Source/Drain Austrittsarbeit $\Phi_M = 5.0\text{eV}$.

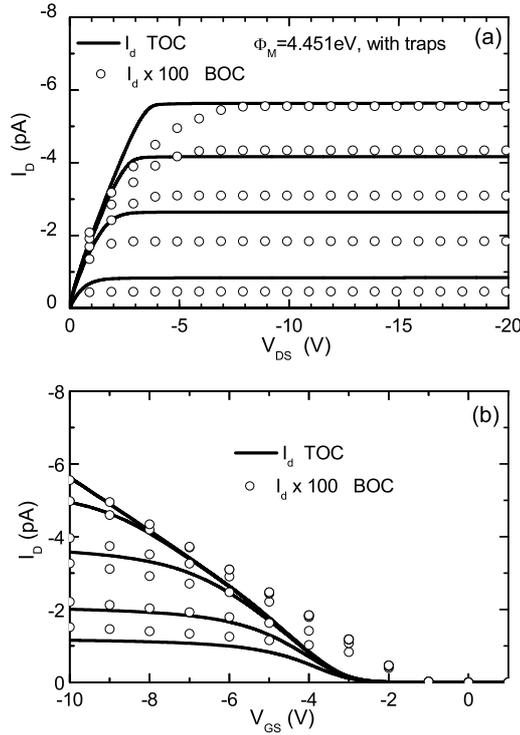


Abbildung 4.6: Ausgangskennlinien (a) (Gatespannung $-V_{GS} = 2(2)10V$) und Transferkennlinien (b) (Drainspannung $-V_{DS} = 0.5, 1, 2, 3, 5, 10V$) für die TOC- und BOC-Struktur im Fall hoher Trapkonzentration ($N_0 = 2.2 \times 10^{20}(\text{eV})^{-1}\text{cm}^{-3}$, $E_S = 0.1\text{eV}$) und der niedrigeren Source/Drain Austrittsarbeit $\Phi_M = 4.451\text{eV}$.

Für die gleiche Trapverteilung ändert sich die Situation drastisch im Fall einer niedrigeren Source/Drain Austrittsarbeit von 4.451eV . Wie bereits erläutert, hat man nun einen Neutralkontakt mit einer verhältnismäßig hohen Konzentration getrappter Löcher und einer extrem niedrigen Konzentration beweglicher Löcher. Das führt zu wesentlich niedrigeren Strömen, wie in Abb. 4.6 zu sehen ist. Des Weiteren sind die Ströme im BOC-Transistor um etwa einen Faktor 100 niedriger als im TOC-Transistor. Außerdem findet man einen abrupten Übergang vom aktiven Bereich in die Sättigung für die TOC-Struktur, jedoch nicht für die BOC-Struktur. Bei beiden Strukturen erhält man eine nicht-quadratische Abhängigkeit des Sättigungsstromes von der Gatespannung und ein nicht-lineares Verhalten im aktiven Bereich. Dabei ist für Gatespannungen größer als die Drainspannung der Drainstrom nahezu unabhängig von der Gatespannung. Die Schwellspannungen der beiden Strukturen sind weniger verschoben als für die größere Austrittsarbeit. Wiederum tritt im Subthreshold-Bereich kein Unterschied zwischen den beiden Strukturen auf (hier nicht dargestellt).

Diese Besonderheiten, verursacht durch die Trapverteilung, die Natur der Source/Drain Kontakte und die unterschiedliche Transistorgeometrie, können mittels der internen Dichte- und Feldprofile verstanden werden. In Abb. 4.7 (BOC) und Abb. 4.8 (TOC) sind die Dichten der beweglichen Löcher und getrappten positiven Ladungen für $V_{GS} = -10V$ und $V_{DS} = -4V$ (aktive Bereich des Transistors) gezeigt von der Mitte des Sourcekontaktes aus senkrecht zum Kontakt in die Halbleiterschicht hinein. Für die BOC-Struktur ist dies das Profil in der Mitte der aktiven Schicht nahe Source parallel zum Kanal, hingegen für die TOC-Struktur das Profil senkrecht zur aktiven Schicht zwischen Source und der Grenzfläche zum Gateiso-

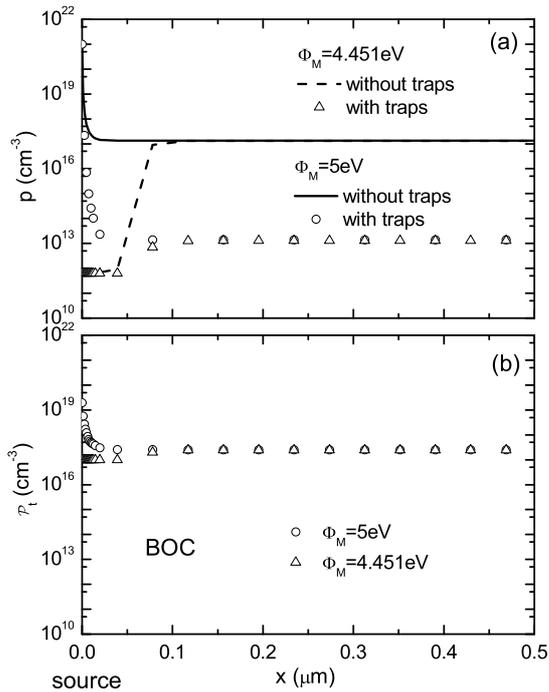


Abbildung 4.7: Bewegliche Löcherdichte (a) und getrappte positive Ladungsdichte (b) im BOC-Transistor (Abb. 4.2b) von der Mitte des Sourcekontaktes bei $y = 0.015\mu\text{m}$ in Richtung Drain parallel zum Kanal. Gatespannung -10V und Drainspannung -4V , Trapparameter $N_0 = 2.2 \times 10^{20}(\text{eV})^{-1}\text{cm}^{-3}$, $E_S = 0.1\text{eV}$.

lator. Es werden die Fälle ohne Traps und mit hoher Trapkonzentration für die zwei Austrittsarbeiten 5.0eV und 4.451eV verglichen. In Abb. 4.7 ist die Situation für den BOC-Transistor dargestellt (Koordinaten in Abb. 4.2b). Ohne Traps ist die Lochkonzentration p in der Mitte der aktiven Schicht gleich der Bulk-Konzentration (10^{17}cm^{-3}), da der durch die Gatespannung induzierte Anreicherungskanal innerhalb der Anreicherungslänge ($l_{acc} = 4.8\text{nm}$) an der Grenzfläche zum Isolator begrenzt ist. Nur nahe Source erzwingt die Randbedingung den entsprechenden Wert der Ladungsträgerdichte. Folglich ergibt sich für eine Austrittsarbeit von 5.0eV eine Lochanreicherung am Kontakt und für eine Austrittsarbeit von 4.451eV tritt Verarmung auf. Mit Traps hat die Dichte getrappter positiver Ladungen \mathcal{P}_t (Abb. 4.7b) meist Bulk-Konzentration und ist am Sourcekontakt erhöht (vermindert) für die größere (niedrigere) Austrittsarbeit. Im Gegensatz dazu ist die Dichte beweglicher Löcher etwa vier Größenordnungen niedriger, jedoch immer noch viel größer als der Bulk-Wert ($4.6 \times 10^{11}\text{cm}^{-3}$ gemäß Abb. 4.3). Somit hat man für eine Austrittsarbeit von 4.451eV dennoch Verarmung an diesem Neutralkontakt. Und näher zur Isolatorgrenzfläche ist die durch die Gatespannung induzierte Lochdichte noch größer. Auf diese Weise wirkt, bei einer Austrittsarbeit von 4.451eV , der Sourcekontakt als ein in Sperrichtung gepolter Schottky-Kontakt für bewegliche Löcher, was die extrem niedrigen Ströme verursacht (vergleiche Abb. 4.6). Dabei fällt der größte Teil der Source-Drain-Spannung über der Verarmungsschicht ab (siehe weiter unten). Der Drainkontakt mit gleicher Austrittsarbeit ist dann natürlich ein in Durchlaßrichtung gepolter Schottky-Kontakt. Im Gegensatz dazu sind die Kontakte für eine Austrittsarbeit von 5.0eV ohmisch und die mäßige Verminderung des Stromes im Fall einer Trapverteilung resultiert aus der niedrigeren Konzentration beweglicher Löcher (im Kanal), verursacht durch die Traps.

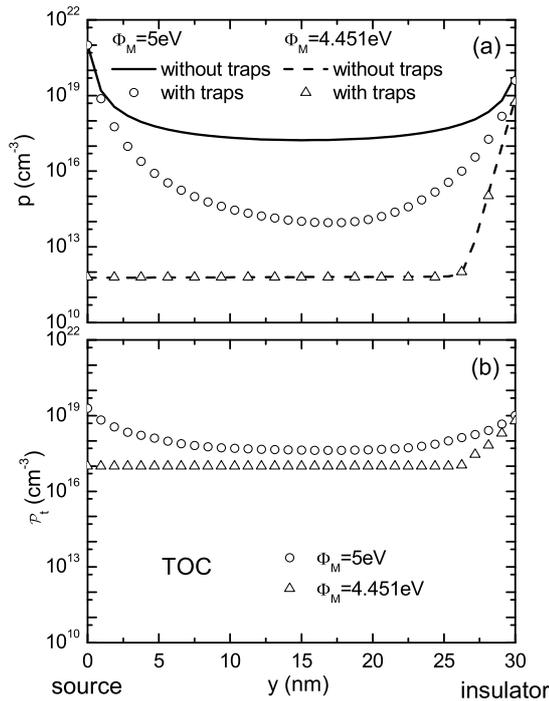


Abbildung 4.8: Bewegliche Löcherdichte (a) und getrappte positive Ladungsdichte (b) im TOC-Transistor (Abb. 4.2a) von der Mitte des Sourcekontaktes bei $x = 2.5\mu\text{m}$ in Richtung Gateisolator senkrecht zur aktiven Schicht. Gatespannung -10V und Drainspannung -4V , Trappparameter $N_0 = 2.2 \times 10^{20}(\text{eV})^{-1}\text{cm}^{-3}$, $E_S = 0.1\text{eV}$.

Abb. 4.8 zeigt die Verhältnisse für die TOC-Struktur. Für 5.0eV Austrittsarbeit ohne Traps findet man eine hohe Konzentration beweglicher Löcher über der gesamten Schicht von Source bis zum Isolator. Anreicherung am Sourcekontakt wird durch die Randbedingung verursacht. Gemäß der angelegten Gatespannung wird an der Grenzfläche zum Isolator ein Kanal mit hoher Lochkonzentration induziert. Der Serienwiderstand des Gebietes zwischen Source und dem Kanal ist aufgrund der hohen Konzentration von Ladungsträgern über der gesamten Schicht vernachlässigbar. Daher gibt es auch keinen Unterschied in den Kennlinien der beiden Transistorstrukturen, wie in Abb. 4.4 gezeigt. Eine Trapverteilung bewirkt eine niedrigere Konzentration beweglicher Löcher in der Schicht. Für die betrachtete Trapkonzentration fällt ihre Dichte innerhalb der Schicht bis auf 10^{14}cm^{-3} ab. Der Spannungsabfall über diesem Gebiet mit niedriger Konzentration nahe Source wirkt sich nun auf den Strom aus. Infolgedessen sind die Ströme für die TOC-Struktur aufgrund des zusätzlichen Serienwiderstandes niedriger als für die BOC-Struktur (vergleiche Abb. 4.5). Im Fall der niedrigen Austrittsarbeit von 4.451eV ist die Konzentration getrappter positiver Ladungen am Kontakt auf 10^{17}cm^{-3} festgelegt und die der beweglichen Löcher auf etwa $6 \cdot 10^{11}\text{cm}^{-3}$. Diese niedrige Konzentration beweglicher Löcher erstreckt sich nahezu über die gesamte Schicht, nur an der Isolatorgrenzfläche nimmt die Konzentration zu. Dies führt zu einem ziemlich großen Spannungsabfall über dem Sourcegebiet und folglich zu einem sehr großen Serienwiderstand, was die in Abb. 4.6 gezeigten niedrigen Ströme ergibt. In diesem Fall sind die Ströme allerdings immer noch größer als für die BOC-Struktur, im Gegensatz zu den Kennlinien in Abb. 4.5. Wie bereits diskutiert, ist für die niedrige Austrittsarbeit der Strom der BOC-Struktur durch einen in Sperrichtung gepolten Schottky-Kontakt limitiert, während die TOC-Struktur nur durch einen großen Serienwiderstand be-

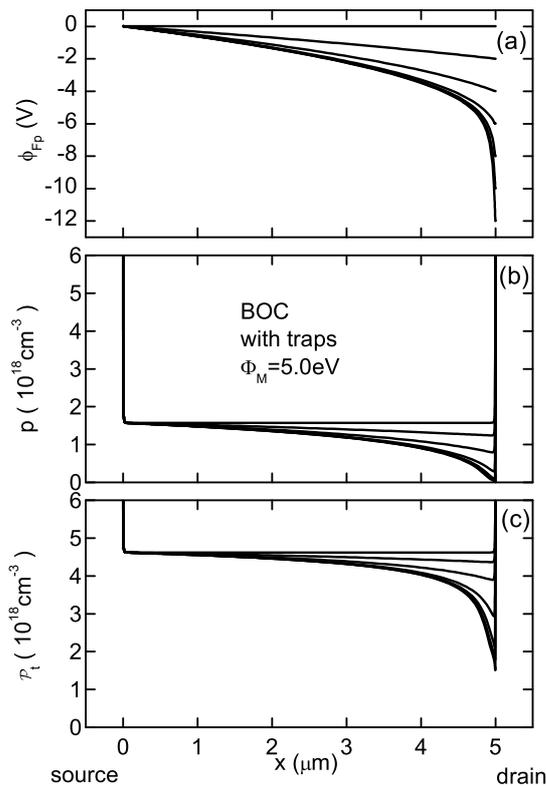


Abbildung 4.9: Quasi-Fermi-Potential (a), bewegliche Löcherdichte (b) und getrappte positive Ladungsdichte (c) 1nm unterhalb der Isolatorgrenzfläche für die BOC-Struktur mit $\Phi_M = 5.0\text{eV}$. Gatespannung $V_{GS} = -10\text{V}$ und variable Drainspannung $-V_{DS} = 0(2)12\text{V}$ von oben beginnend. Trappparameter $N_0 = 2.2 \times 10^{20}(\text{eV})^{-1}\text{cm}^{-3}$, $E_S = 0.1\text{eV}$.

einflußt wird. Der Effekt dieses Serienwiderstandes wird noch größer sein im Fall von anisotropen Transport mit einer niedrigeren Beweglichkeit senkrecht zur Schicht, was zum Beispiel in spin-coated P3OT Schichten vorkommt [88].

Ein näheres Verständnis wird aus den Profilen entlang des Anreicherungskannels erreicht. Für die BOC-Struktur mit einer Source/Drain Austrittsarbeit von 5.0eV und mit Trapverteilung sind in Abb. 4.9 das Quasi-Fermi-Potential (a), die bewegliche Löcherdichte (b) und die getrappte Löcherdichte (c) 1nm unterhalb der Isolatorgrenzfläche dargestellt für eine festgelegte Gatespannung und eine Variation der Drainspannung. Wie für die entsprechenden Strom-Spannungs-Kennlinien (Abb. 4.5) findet man, dass die Profile qualitativ mit dem gewöhnlichen Verhalten vergleichbar sind. Im aktiven Bereich fällt das Quasi-Fermi-Potential linear über dem Kanal ab und für große Drainspannungen im Sättigungsbereich variiert es nur noch am Drainkontakt. Im aktiven Bereich sind die bewegliche Löcherdichte und die getrappte positive Ladungsdichte konstant über dem gesamten Kanal, wobei die Dichte der getrappten positiven Ladungen größer ist als die der beweglichen Löcher. Die Abschnürung (pinch-off) des Kanals nahe Drain mit ansteigender Drainspannung erscheint für beide, getrappte positive Ladungen und bewegliche Löcher. Sättigung tritt auf, wenn $p < N_A^-$ nahe Drain erfüllt wird. Direkt an den Source/Drain Kontakten steigen beide Dichten aufgrund der Randbedingung (große Austrittsarbeit) an.

In Abb. 4.10 ist die hohe Source/Drain Austrittsarbeit durch den niedrigeren Wert von 4.451eV ersetzt worden. Wie auch für die entsprechenden Strom-Spannungs-

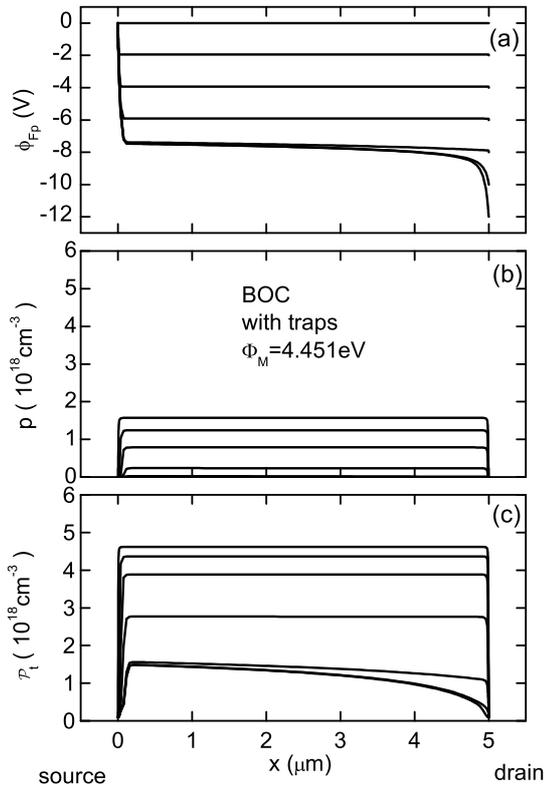


Abbildung 4.10: Quasi-Fermi-Potential (a), bewegliche Löcherdichte (b) und getrappte positive Ladungsdichte (c) 1nm unterhalb der Isolatorgrenzfläche für die BOC-Struktur mit $\Phi_M = 4.451\text{eV}$. Gatespannung $V_{GS} = -10\text{V}$ und variable Drainspannung $-V_{DS} = 0(2)12\text{V}$ von oben beginnend. Trappparameter $N_0 = 2.2 \times 10^{20}(\text{eV})^{-1}\text{cm}^{-3}$, $E_S = 0.1\text{eV}$.

Kennlinien in Abb. 4.6 findet man Abweichungen vom gewöhnlichen Verhalten. Zunächst tritt ein großer Abfall des Quasi-Fermi-Potentials am Sourcekontakt auf (sperrgepolter Schottky-Kontakt). Dadurch ist im aktiven Bereich das Quasi-Fermi-Potential im Kanal konstant. Der Spannungsabfall an Source nimmt bis -7.5V zu für eine Source-Drain-Spannung von -8V . Da ist der Übergang in die Sättigung und mit weiterer Erhöhung der (negativen) Source-Drain-Spannung variiert das Quasi-Fermi-Potential nur noch an Drain. Im aktiven Bereich sind außerdem die bewegliche Löcherdichte als auch die getrappte positive Ladungsdichte wieder konstant über dem gesamten Kanal und die Dichte der getrappten positiven Ladungen ist größer als die der beweglichen Löcher. Beide Dichten nehmen mit zunehmender Drainspannung ab. Wie gewöhnlich tritt Sättigung für $p < N_A^-$ nahe Drain auf (hier für $V_{DS} = -8\text{V}$). Jedoch tritt in diesem Fall praktisch nur eine Verarmung der Traps nahe Drain auf, die niedrigere bewegliche Lochkonzentration hingegen bleibt konstant.

Abb. 4.11 zeigt die gleichen Abhängigkeiten für die TOC-Struktur mit einer Source/Drain Austrittsarbeit von 4.451eV (Strom-Spannungs-Kennlinien in Abb. 4.6). Da die Profile entlang des Anreicherungskanal gerade 1nm unterhalb der Isolatorgrenzfläche dargestellt sind, haben Source und Drain von dieser Position aus einen senkrechten Abstand von 29nm (Abb. 4.2a). Wie oben diskutiert (siehe Abb. 4.8), führt dieses Gebiet zwischen Source und dem Kanal aufgrund der geringen Löcherdichte zu einem Serienwiderstand. Als Folge fällt bis zu einer Drainspannung von -4V das Quasi-Fermi-Potential fast ausschließlich dort ab, bis zu einem Wert von etwa -3V (Abb. 4.11a) und es gibt keinen signifikanten Spannungsabfall entlang des

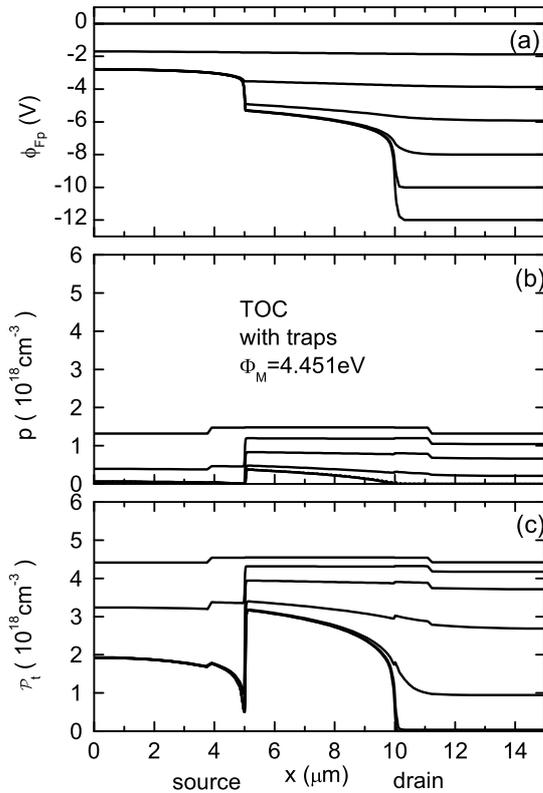


Abbildung 4.11: Quasi-Fermi-Potential (a), bewegliche Löcherdichte (b) und getrappte positive Ladungsdichte (c) 1nm unterhalb der Isolatorgrenzfläche für die TOC-Struktur mit $\Phi_M = 4.451\text{eV}$. Gatespannung $V_{GS} = -10\text{V}$ und variable Drainspannung $-V_{DS} = 0(2)12\text{V}$ von oben beginnend. Trappparameter $N_0 = 2.2 \times 10^{20}(\text{eV})^{-1}\text{cm}^{-3}$, $E_S = 0.1\text{eV}$.

Kanals. Für diese niedrigen Drainspannungen sind die beweglichen Löcherdichten und getrappten positiven Ladungsdichten entlang des Kanals konstant, wobei die Konzentration im gesamten Kanal mit zunehmender Drainspannung abfällt. Außerdem erreicht die entsprechende Strom-Spannungs-Kennlinie ($V_{GS} = -10\text{V}$) bei der Drainspannung von -4V Sättigung mit dem charakteristischen abrupten Übergang (Abb. 4.6). Dabei hat man im Kanal gegenüberliegend von Drain immer noch $p > N_A^-$ im Gegensatz zum gewöhnlichen Übergang in die Sättigung. Die Verarmung der Traps (am drainseitigen Ende des Kanals) tritt auch für Drainspannungen größer als -4V auf. Folglich wird der Übergang in die Sättigung hier durch den Einfluß des Serienwiderstandes verursacht. Die übliche Bedingung $p < N_A^-$ für die Sättigung ist nur für größere Drainspannungen erfüllt, verbunden mit einer Variation des Quasi-Fermi-Potentials ausschließlich an Drain. Der Mechanismus, welcher zu der abrupten Sättigung der Kennlinien führt, wird im Kapitel über den Source-Gated-Transistor (SGT) im Detail diskutiert. Zwar sind die Rechnungen dort für a-Silizium als aktive Schicht durchgeführt, die Ergebnisse sind jedoch völlig analog übertragbar.

Ohne Traps und für die niedrige Austrittsarbeit von 4.451eV gibt es ebenso eine niedrige Ladungsträgerkonzentration im gesamten Sourcegebiet, wie in Abb. 4.8 zu sehen. Der resultierende große Serienwiderstand wirkt gleichermaßen auf den Strom mit dem typischen abrupten Übergang. Dies wird durch die in Abb. 4.12 gezeigten Kennlinien bestätigt. Dargestellt sind jeweils Ausgangs- und Transferkennlinien der TOC-Struktur im Fall ohne und mit Trapverteilung für zwei verschiedene Austrittsarbeiten. Dabei entspricht $\Phi_M = 4.451\text{eV}$ gerade der Neutralkontaktbedingung im

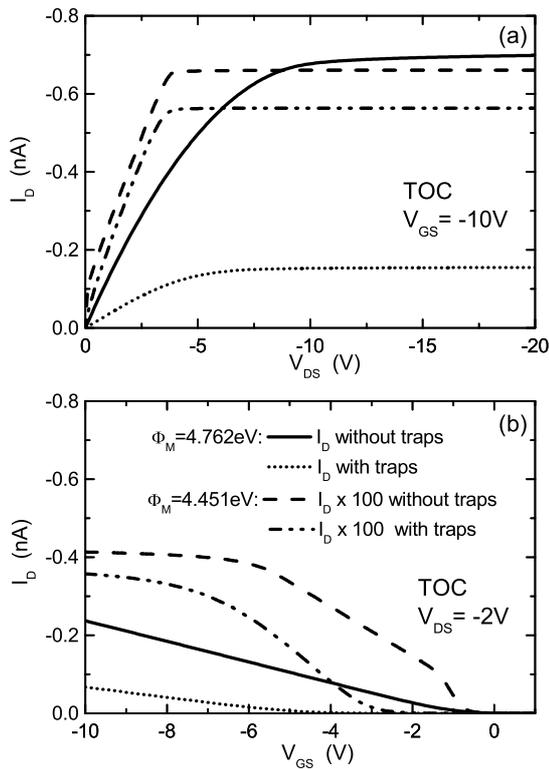


Abbildung 4.12: Vergleich der Ausgangskennlinien ($V_{GS} = -10V$) (a) und Transferkennlinien ($V_{DS} = -2V$) (b) für Austrittsarbeiten von $\Phi_M = 4.451eV$ und $\Phi_M = 4.762eV$ jeweils mit (Trapparameter $N_0 = 2.2 \times 10^{20} (eV)^{-1} cm^{-3}$, $E_S = 0.1eV$) und ohne Trapverteilung für die TOC-Struktur.

Fall mit und $\Phi_M = 4.762eV$ im Fall ohne Trapverteilung. Der abrupte Übergang der Ausgangskennlinie in die Sättigung tritt dabei nur für die geringere Austrittsarbeit auf, wie auch das nicht-lineare Verhalten der Transferkennlinie. Dabei sind auch die Ströme wesentlich kleiner als im Fall der größeren Austrittsarbeit. Folglich sind diese Eigenheiten wie auch die nicht-quadratische Abhängigkeit des Sättigungsstromes von der Gatespannung sämtlich verursacht durch die niedrige Austrittsarbeit und sie sind unabhängig vom Vorhandensein von Trapzuständen. In der Tat sind mehrere 2D Simulationen für den trap-freien Fall [83–86] und für entweder TOC- oder BOC-Transistoren mit ohmschen- oder Schottky-Kontakten für Source/Drain mit ähnlichen Rückschlüssen berichtet worden, aber insbesondere ohne einen detaillierten Vergleich der Strom-Spannungs-Kennlinien.

Wie im Fall des BOC-Transistors so ist auch für den TOC-Transistor mit der größeren Source/Drain Austrittsarbeit von $5.0eV$ das Verhalten qualitativ vergleichbar mit dem herkömmlichen Verhalten. Die entsprechenden Profile entlang des Anreicherungskanal sind in Abb. 4.13 gezeigt. Für die TOC-Struktur mit einer Source/Drain Austrittsarbeit von $5.0eV$ und mit Trapverteilung ist wieder das Quasi-Fermi-Potential (a), die bewegliche Löcherdichte (b) und die getrappte positive Ladungsdichte (c) 1nm unterhalb der Isolatorgrenzfläche dargestellt für eine festgelegte Gatespannung und eine Variation der Drainspannung. Hierbei gelten analoge Aussagen wie für die BOC-Struktur in Abb. 4.9.

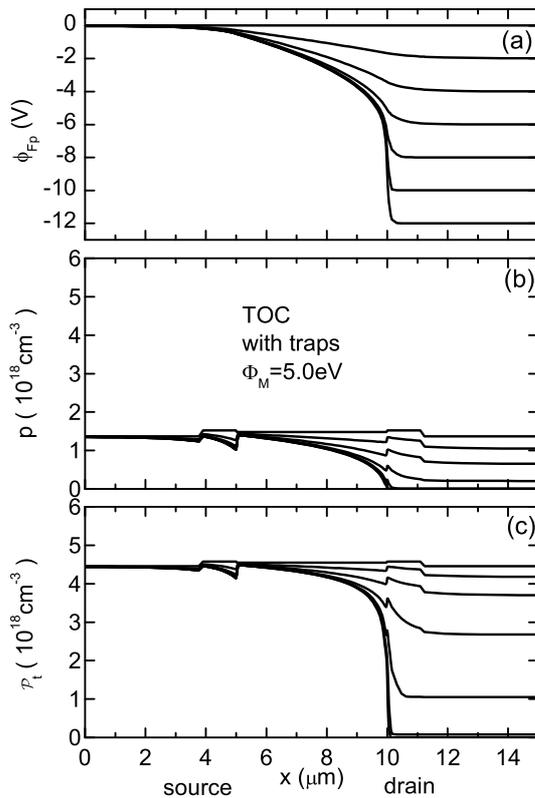


Abbildung 4.13: Quasi-Fermi-Potential (a), bewegliche Löcherdichte (b) und getrappte positive Ladungsdichte (c) 1nm unterhalb der Isolatorgrenzfläche für die TOC-Struktur mit $\Phi_M = 5.0\text{eV}$. Gatespannung $V_{GS} = -10\text{V}$ und variable Drainspannung $-V_{DS} = 0(2)12\text{V}$ von oben beginnend. Trappparameter $N_0 = 2.2 \times 10^{20}(\text{eV})^{-1}\text{cm}^{-3}$, $E_S = 0.1\text{eV}$.

4.3.3 Variation der Trapkonzentration bei ohmschen Kontakten

Bisher ist in den Beispielen eine hohe Trapkonzentration betrachtet worden. Nun wird die Abhängigkeit von der Trapkonzentration demonstriert. Hier wird nur der Fall einer großen Source/Drain Austrittsarbeit von 5.0eV in Betracht gezogen, weil in diesem Fall der Einfluß der Trapverteilung nicht durch die Limitierung am Kontakt überdeckt ist. In Abb. 4.14 sind für den BOC-Transistor die Ausgangskennlinien (a), die Transferkennlinien (b) und letztere nochmals auf logarithmischer Skala (Darstellung des Subthreshold-Bereiches) (c) dargestellt für eine Variation der Trapkonzentration $N_0 = 0, 2 \times 10^{19}, 5 \times 10^{19}, 2 \times 10^{20}, 2.2 \times 10^{20}\text{cm}^{-3}(\text{eV})^{-1}$ und einer Abfallkonstanten von $E_S = 0.1\text{eV}$. Der Strom nimmt allmählich mit zunehmender Trapkonzentration ab, sowohl im aktiven als auch im Sättigungsbereich ohne weitere Besonderheiten. Wegen der exponentiellen Natur der Trapverteilung steigt jedoch diese Abnahme des Stromes zunehmend mit der Trapkonzentration an (vergleiche die Abhängigkeiten für 2×10^{20} und $2.2 \times 10^{20}\text{cm}^{-3}(\text{eV})^{-1}$). Mit steigender Trapkonzentration steigt auch die Einsatzspannung (turn-on voltage) von etwa 0.1V im Fall ohne Traps auf etwa -2.6V im Fall der höchsten betrachteten Trapkonzentration an. Von besonderem Interesse ist der Einfluß auf das Subthreshold-Verhalten (Abb. 4.14c). Für größere positive Gatespannungen hat der Subthreshold-Strom einen idealen inversen Subthreshold-Anstieg von $60\text{mV}/\text{dec}$ und ist unabhängig von der Trapkonzentration. Aber zwischen dem Wert der Einsatzspannung im Fall ohne

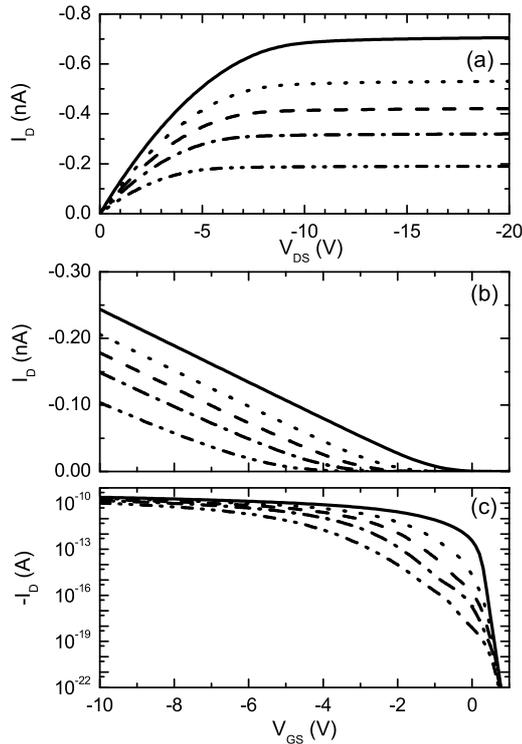


Abbildung 4.14: Ausgangskennlinien ($V_{GS} = -10V$) (a), Transferkennlinien ($V_{DS} = -2V$) (b) und die gleichen Transferkennlinien in logarithmischer Auftragung (Subthreshold-Verhalten) (c) für die BOC-Struktur mit einer Source/Drain Austrittsarbeit $\Phi_M = 5.0eV$. Die Konzentration der exponentiell verteilten Traps wird von oben beginnend variiert: $N_0 = 0, 2 \times 10^{19}, 5 \times 10^{19}, 2 \times 10^{20}, 2.2 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}(\text{eV})^{-1}$; $E_S = 0.1eV$.

Traps und jenem mit Traps erscheint ein Bereich mit einem ziemlich großen inversen Subthreshold-Anstieg von etwa $\approx 600\text{mV}/\text{dec}$, welcher nahezu unabhängig von der Trapkonzentration ist. Nur das Intervall wächst gemäß der Verschiebung der Einsatzspannung mit steigender Trapkonzentration. Die Abhängigkeiten sind für die TOC-Struktur im wesentlichen die gleichen, obwohl man mit ansteigender Trapkonzentration den zunehmenden Serienwiderstand der TOC-Struktur berücksichtigen muss. Aus diesem Grund weist die TOC-Struktur zunehmend etwas niedrigere Ströme auf als die BOC-Struktur.

4.3.4 Effektive Feldeffekt-Beweglichkeit

In Anwesenheit einer Trapverteilung ist nur ein Bruchteil der durch das Feld induzierten Löcher beweglich und deswegen ist der Strom niedriger als im trap-freien Fall. Auswertungen von gemessenen oder simulierten Strom-Spannungs-Kennlinien mit den gängigen Methoden ergeben Werte für die Beweglichkeit, welche dementsprechend niedriger sind als die tatsächliche Beweglichkeit der beweglichen Ladungsträger. Im a-Si-Modell wird dieser Effekt formal durch Einführung einer effektiven Beweglichkeit, wie in Gleichung (4.2) definiert, beschrieben. Die Flächenladungsdichten der beweglichen Löcher und getrapten positiven Ladungen sind für den homogenen Kanal (Drainspannung $0V$) als Integrale über die jeweiligen Dichten p und \mathcal{P}_t

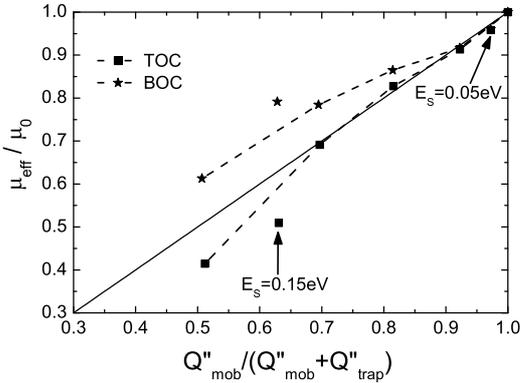


Abbildung 4.15: Effektive Beweglichkeit in Abhängigkeit vom Verhältnis beweglicher zu gesamt induzierter Flächenladung bei $V_{GS} = -10V$ für den TOC- und den BOC-Transistor mit einer Source/Drain Austrittsarbeit von $\Phi_M = 5.0eV$. Die Konzentration der exponentiell verteilten Traps wird wie in Abb. 4.14 variiert, die Breite der Trapverteilung ist $E_S = 0.1eV$ oder wie angegeben. Gerade: analytische Näherung nach Gleichung (4.2).

(relativ zu ihren Bulk-Werten) senkrecht zum Kanal definiert

$$Q''_{mob} = e \cdot \int_0^{d_{org}} (p - p_{bulk}) dy,$$

$$Q''_{trap} = e \cdot \int_0^{d_{org}} (\mathcal{P}_t - \mathcal{P}_{t,bulk}) dy. \quad (4.4)$$

Diese Größen hängen natürlich sowohl von der angelegten Gatespannung als auch von der Trapkonzentration ab. In der Simulation werden sie direkt aus den berechneten Profilen bestimmt. Die effektiven Beweglichkeiten werden aus dem linearen Anstieg der Ausgangskennlinie für eine gegebene Gatespannung ($-10V$ in Abb. 4.15) bestimmt. Dabei wird die Schwellspannung benötigt, welche aus der linearen Darstellung der Transferkennlinie abgeschätzt wird. Eine weitere Möglichkeit wäre, die Beweglichkeit aus dem Anstieg der Transferkennlinie zu bestimmen. Für den BOC- und den TOC-Transistor wird diese effektive Beweglichkeit in Abb. 4.15 bildlich dargestellt in Abhängigkeit vom Verhältnis der beweglichen und der gesamten induzierten Ladungen (Gebrauch der Gleichungen (4.4)) für eine Variation der Trapkonzentration wie im vorhergehenden Abschnitt (siehe Abb. 4.14). Es sind einige Werte für eine größere und kleinere Abfallkonstante der Trapverteilung eingefügt. Die Gerade repräsentiert die analytische Näherung gemäß Gleichung (4.2). Trotz ihrer Einfachheit weicht die analytische Näherung (4.2) selbst bei hoher Trapkonzentration (und für den mittleren Wert der Abfallkonstanten $E_S = 0.1eV$) nur bis zu 20% von der numerischen Simulation ab. Der Unterschied zwischen der BOC- und der TOC-Struktur ist natürlich nur mittels Simulation zugänglich. Bei der TOC-Struktur verursacht der Serienwiderstand einen geringeren Anstieg der Ausgangskennlinie, was zu einer scheinbar geringeren effektiven Beweglichkeit führt.

4.3.5 Gaußsche Trapverteilung, tail-Zustände und Dotierung

Verschiedene weitere Einflüsse sind mittels Simulationen untersucht worden. In diesem Abschnitt werden ausgewählte Ergebnisse zusammengefaßt. Zunächst ist die

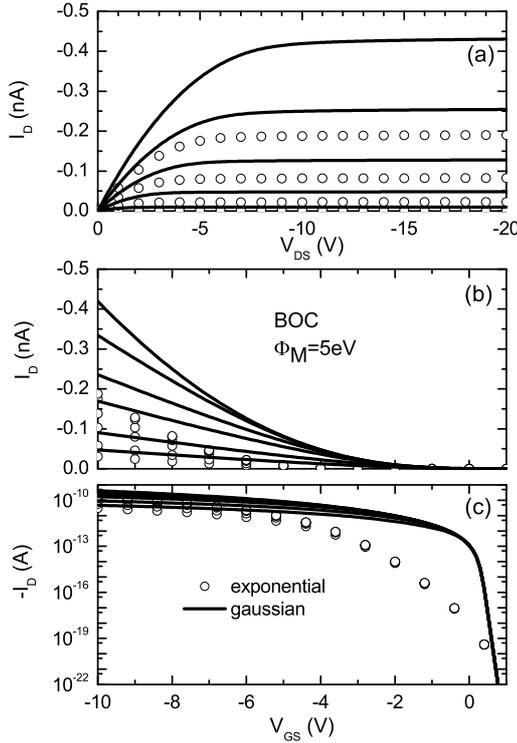


Abbildung 4.16: Vergleich zwischen Exponential- und Gaußverteilung der Traps. Dargestellt sind jeweils die Ausgangskennlinien (a) (Gatespannung $-V_{GS} = 2(2)10V$), die Transferkennlinien (b) (Drainspannung $-V_{DS} = 0.5, 1, 3, 5, 10V$) und die logarithmische Auftragung der Transferkennlinien (Subthreshold-Verhalten) (c) für die BOC Transistorstruktur im Fall hoher Trapverteilung: $N_0 = 2.2 \times 10^{20}(\text{eV})^{-1}\text{cm}^{-3}$, $E_S = E_S^{\text{gauss}} = 0.1\text{eV}$ und einer Source/Drain Austrittsarbeit von $\Phi_M = 5.0\text{eV}$.

exponentielle Trapverteilung (4.1) entsprechend dem a-Si-Modell durch eine Gaußverteilung mit der Zustandsdichte

$$D_{\text{dt/at}}^{\text{gauss}} = N_0 \exp \left\{ -0.5 \left| \frac{E - E_0}{E_S^{\text{gauss}}} \right|^2 \right\} \quad (4.5)$$

ersetzt worden, wo das Maximum wieder an den Bandkanten liegt (ein Maximum innerhalb der Bandlücke entspricht einer Ausschmierung des Einflusses tiefer Traps, welche zum Beispiel in [62, 67, 87] betrachtet wurden). Der Einfluß einer derartigen Verteilung ist im Prinzip der gleiche wie zuvor: Nur ein Bruchteil der durch das Feld induzierten Löcher ist beweglich, während der getrappte Anteil nicht zum Strom beiträgt. Im Fall der Gaußverteilung mit einer Konstanten von $E_S^{\text{gauss}} = 0.1\text{eV}$ liegt der größte Teil der Trapzustände (68%) innerhalb eines Energieintervalls von 0.1eV an den Bandkanten. Aufgrund dieses schnellen Abfalls ist der Anteil getrappter Ladungen geringer als für die exponentielle Verteilung mit einer Abfallkonstanten von $E_S = 0.1\text{eV}$. Daher ergeben sich bei diesen Parametern größere Ströme im Fall der gaußverteilten Traps als für die exponentielle Verteilung, wie in Abb. 4.16 gezeigt. Besonders deutlich ist der geringere Einfluß der Gaußverteilung auf das Subthreshold-Verhalten. Das liegt eben daran, dass die gaußverteilten Zustände viel stärker an den Bandkanten konzentriert sind und damit eben erst bei größeren (negativen) Gatespannungen umgeladen werden und die Kennlinien beeinflussen. Mit höherer Konzentration und/oder größerer Konstanten E_S^{gauss} sind die Auswirkungen dieser Verteilung im wesentlichen die gleichen wie für die exponentielle Verteilung.

Tail-Zustände als ein weiteres Merkmal des a-Si-Modells wurden bisher vernachlässigt. Tatsächlich beeinflussen diese Zustände im Fall von ohmschen Source-

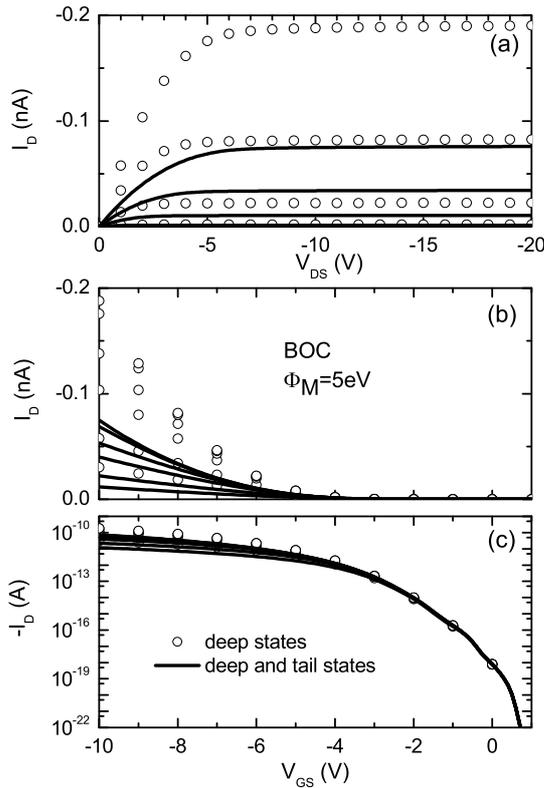


Abbildung 4.17: Einfluß der tail-Zustände. Dargestellt sind die Ausgangskennlinien (a) (Gatespannung $-V_{GS} = 2(2)10\text{V}$), die Transferkennlinien (b) (Drainspannung $-V_{DS} = 0.5, 1, 3, 5, 10\text{V}$) und die logarithmische Auftragung der Transferkennlinien (Subthreshold-Verhalten) (c) für die BOC-Struktur im Fall hoher Trapverteilung ($N_0 = 2.2 \times 10^{20}(\text{eV})^{-1}\text{cm}^{-3}$, $E_S = 0.1\text{eV}$) und einer Source/Drain Austrittsarbeit von $\Phi_M = 5.0\text{eV}$ jeweils mit und ohne zusätzlicher tail-Zustände ($N_0^{tail} = 3 \times 10^{22}(\text{eV})^{-1}\text{cm}^{-3}$, $E_S^{tail} = 0.021\text{eV}$).

und Drainkontakten die Strom-Spannungs-Kennlinien deutlich. Aber wie schon erwähnt, ist nur bedeutend, wie die Lochdichte in einen beweglichen und getrapten Anteil aufgespalten wird. Eine zusätzliche Verteilung an tail-Zuständen führt zu einer insgesamt höheren Trapkonzentration und resultiert in einer weiteren Erniedrigung des Stromes. Man erhält jedoch keine qualitativ neuen Besonderheiten der Transistorkennlinien. Die tail-Zustände haben keinen Einfluß auf das Subthreshold-Verhalten und auf die Einsatzspannung, weil in diesem Bereich das Fermi-Niveau weitab von diesen Zuständen ist. Ihr Einfluß wächst mit zunehmender (negativer) Gatespannung. In Abb. 4.17 sind dazu die entsprechenden Kennlinien dargestellt. Für den Fall der bislang höchsten exponentiellen Trapverteilung ist der Einfluß zusätzlicher tail-Zustände gezeigt. Für eine niedrige Source/Drain Austrittsarbeit haben die tail-Zustände tatsächlich keinen Einfluß auf die Strom-Spannungs-Kennlinien. In diesem Fall ist das Verhalten durch den Kontakt limitiert und Traps haben nur einen kleinen Einfluß. Folglich ist eine zusätzliche Verteilung an Traps in diesem Fall weniger relevant.

Bisher wurde die Existenz einer Grunddotierung angenommen, modelliert durch vollständig ionisierte Dotanden. In der Tat sind Polymere für OFETs gewöhnlich unbeabsichtigt dotiert, was auch durch Kapazitätsmessungen an MOS-Kondensatoren, welche mit der gleichen Technologie präpariert wurden wie die Transistoren, nachgewiesen worden ist. Eine derart unbeabsichtigt hohe Dotierung könnte im Fall von im Vakuum abgeschiedenen Materialien mit geringem Molekulargewicht fehlen. Daher wurden auch Transistoren ausschließlich mit Trap-Zuständen simuliert. In Abb. 4.18 werden Transistorkennlinien für den Fall mit und ohne einer zusätzlichen Grunddo-

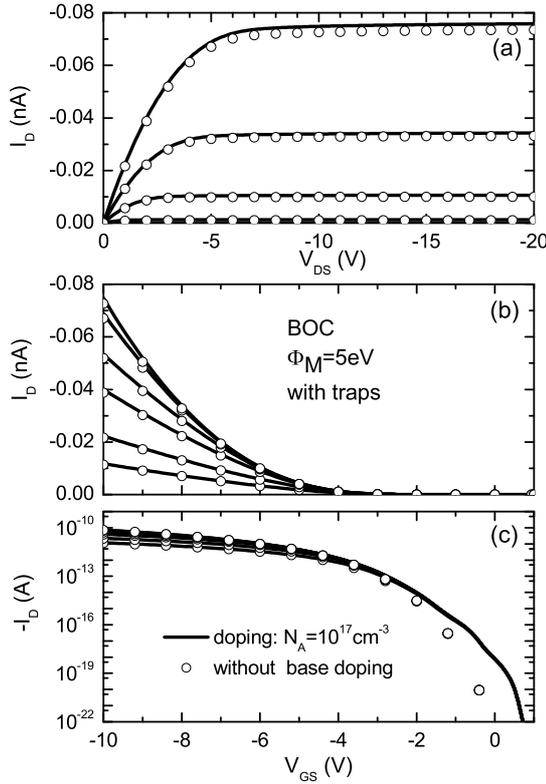


Abbildung 4.18: Einfluß der Grunddotierung. Dargestellt sind die Ausgangskennlinien (a) (Gatespannung $-V_{GS} = 2(2)10\text{V}$), die Transferkennlinien (b) (Drainspannung $-V_{DS} = 0.5, 1, 3, 5, 10\text{V}$) und die logarithmische Auftragung der Transferkennlinien (Subthreshold-Verhalten) (c) für die BOC-Struktur im Fall hoher Trapverteilung mit tail-Zuständen ($N_0 = 2.2 \times 10^{20} (\text{eV})^{-1} \text{cm}^{-3}$, $E_S = 0.1\text{eV}$, $N_0^{tail} = 3 \times 10^{22} (\text{eV})^{-1} \text{cm}^{-3}$, $E_S^{tail} = 0.021\text{eV}$) und einer Source/Drain Austrittsarbeit von $\Phi_M = 5.0\text{eV}$ jeweils mit und ohne zusätzlicher Grunddotierung.

tierung miteinander verglichen, jeweils bei der gleichen angenommenen Trapverteilung (inklusive tail-Zustände, Kennlinien aus Abb. 4.17). Im Fall ohmscher Source- und Drainkontakte weichen die Ausgangs- und Transferkennlinien nur geringfügig von jenen einschließlich einer Grunddotierung ab. Das gilt auch im Fall der niedrigsten betrachteten Trapverteilung. Die Ströme sind ohne einer Grunddotierung etwas niedriger und die Schwellspannung (threshold voltage) ist zu negativeren Gatespannungen verschoben. Mit zunehmender Trapkonzentration wird dies jedoch durch den Einfluß der Traps überlagert, für hohe Trapverteilungen tritt somit keine Änderung der Einsatzspannung (turn-on voltage) auf. Im Subthreshold-Bereich führt die Verschiebung der Schwellspannung nur zu einer Verschiebung der Transferkennlinien. Schließlich wird in Abb. 4.19 noch der Fall ohne einer expliziten Grunddotierung als auch ohne jeglicher Trapverteilung betrachtet. Hier gelten die gleichen Aussagen wie für die Kennlinien in Abb. 4.18. Nur sind jetzt die Ströme entsprechend größer, da es keine getrapten Ladungsträger gibt. Des weiteren ist auch die Verschiebung der Schwellspannung nicht mehr durch den Einfluß einer Trapverteilung überdeckt.

Andererseits erhält man im Fall von nicht-ohmschen Kontakten ohne der Annahme einer expliziten Dotierung keine vernünftigen Transistorkennlinien. Außerdem sind die Ströme dann extrem niedrig und wären nicht meßbar.

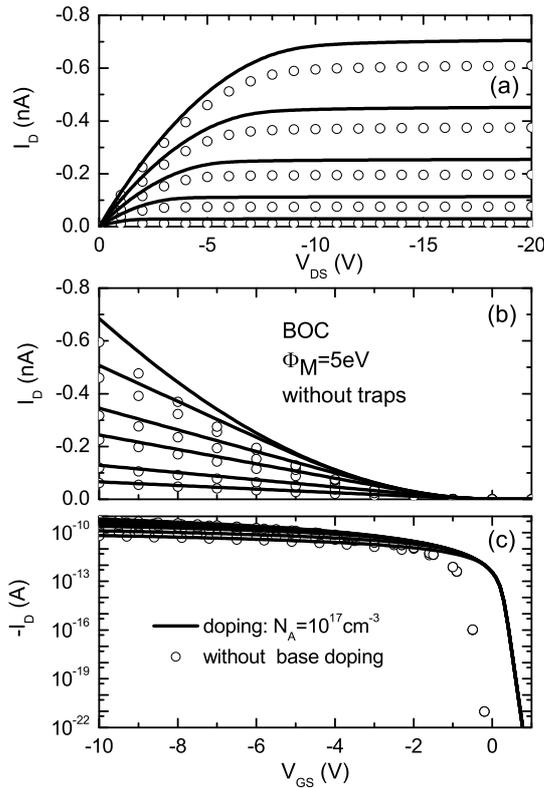


Abbildung 4.19: Einfluß der Grunddotierung im Fall ohne Trapverteilung. Dargestellt sind die Ausgangskennlinien (a) (Gatespannung $-V_{GS} = 2(2)10\text{V}$), die Transferkennlinien (b) (Drainspannung $-V_{DS} = 0,5, 1, 3, 5, 10\text{V}$) und die logarithmische Auftragung der Transferkennlinien (Subthreshold-Verhalten) (c) für die BOC-Struktur mit einer Source/Drain Austrittsarbeit von $\Phi_M = 5,0\text{eV}$ jeweils mit und ohne expliziter Grunddotierung.

4.4 Vergleich mit Experiment und Hysterese - Effekte

Wie bereits erwähnt, gibt es in der Literatur die Aussage, dass das a-Si-Modell (d.h. ein Modell, welches exponentiell verteilte Trapzustände einbezieht) für die Beschreibung von OFETs geeignet sein sollte und zuweilen ist Gleichung (4.2) zur Datenanalyse verwendet worden. Es gab jedoch keinen detaillierten Vergleich zwischen experimentellen Daten und numerischer Simulation. Das Hauptproblem für einen solchen Vergleich entsteht aus Hystereseeffekten in den Strom-Spannungs-Kennlinien. Ohne eine detailliertere Analyse werden sie verbal beweglichen Ionen und/oder Trapumladungen zugeschrieben [89, 90]. In [36, 88] wurde die Hysterese für Bauelemente mit Arylamino-PPV und mit P3OT als aktive Schicht untersucht. Es wird vorgeschlagen, dass sowohl die Bewegung von Ionen als auch ihre Reaktionen zum Beispiel an der Grenzfläche zum Oxid die Hysterese verursacht [91]. Hier werden Ergebnisse für einen OFET mit einem anderen modifizierten PPV als aktive Schicht diskutiert. Es sollte erwähnt werden, dass die Hysterese qualitativ die gleiche ist wie in P3OT Bauelementen.

Experimentell wurde eine TOC-Struktur realisiert mit einer MEH-4-Methyl-TPD-PPV Schicht als aktives Material und einem Siliziumdioxid Isolator mit jeweils einer Schichtdicke von 50nm. Die Kanallänge beträgt $L = 25\mu\text{m}$ und die Kanalweite $w = 1\text{mm}$. Das hoch dotierte n^+ -Si Substrat dient als Gatekontakt mit einer Austrittsarbeit von $\Phi_G = 4,17\text{eV}$. Für die Source- und Drainkontakte wurde Gold

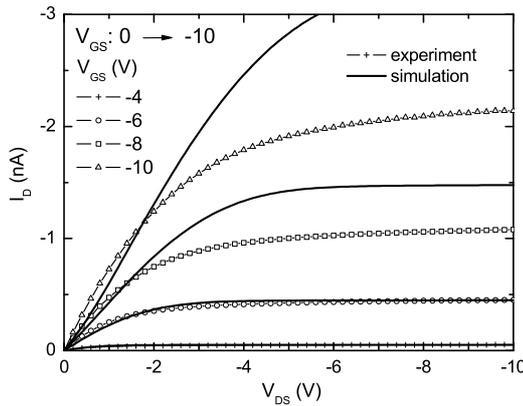


Abbildung 4.20: Gemessene Ausgangskennlinien (mit Symbolen) eines MEH-TPD-PPV OFET und Simulationen mit dem a-Si-Modell (durchgezogene Linien). Die Gatespannung wurde entsprechend $V_{GS} = 0(-2) - 10V$ variiert, die Ströme der beiden niedrigsten Gatespannungen sind nicht in der Abbildung dargestellt.

mit einer Austrittsarbeit von $\Phi_M = 5.0eV$ und einer Kontaktfläche von $(1 \times 1)mm^2$ verwendet. Die Transistorkennlinien wurden für beide Sweep-Richtungen der Gatespannung gemessen und zeigen eine deutliche Hysterese (Abb. 4.20, 4.21). Die zeitliche Reihenfolge war folgendermaßen. Zu Beginn wird die Gatespannung auf $-10V$ geschaltet. Dann wird die Ausgangskennlinie gemessen und danach die Gatespannung auf $-8V$ reduziert und so weiter (Abb. 4.21a) und anschließend wird entsprechend die entgegengesetzte Sweep-Richtung gemessen (Abb. 4.21b). Im Fall der hier betrachteten Ausgangskennlinien wird nach jedem Drainspannungsschritt von $0.2V$ eine kurze Verzögerungszeit (delay time) von ($t_D = 1s$) eingehalten. Die Zeit bevor die Messung nach einer Änderung der Gatespannung beginnt (hold time) ist $t_H = 60s$.

In der Simulation sind die Source- und Drainkontakte auf eine Länge von $5\mu m$ begrenzt worden (was die Kennlinien nicht beeinflusst) und die Weite von $1\mu m$ wurde mit einem Faktor 1000 multipliziert, um die simulierten Daten an die experimentellen anzupassen. Für PPV wurden die folgenden Materialparameter verwendet: dielektrische Konstante $\epsilon = 3.0$, Elektronenaffinität $\chi = 2.6eV$, Bandlücke $E_g = 2.4eV$, effektive Zustandsdichte $N_C = N_V = 10^{21}cm^{-3}$. Die Simulationen haben gezeigt, dass Trapumladung nicht zu den beobachteten Hystereseeffekten führt. Bewegliche Ionen können nicht mit in das Simulationsprogramm einbezogen werden. Demnach könnte es überhaupt schwierig sein, die beobachteten Strom-Spannungskennlinien zu simulieren. Dennoch wurde es mittels obig beschriebenen Modells versucht. Als angemessene Parameter für dieses System wurden gewählt: Grunddotierung $N_A^- = 10^{17}cm^{-3}$, konstante Beweglichkeit $\mu_n = \mu_p = 10^{-4}cm^2/Vs$ und exponentiell verteilte donator- (akzeptor-) artige Traps nahe dem Valenz- (Leitungs-) band mit $N_0 = 2.15 \times 10^{20}cm^{-3}(eV)^{-1}$ und $E_S = 0.1eV$.

Der Vergleich für eine Sweep-Richtung der Gatespannung ist in Abb. 4.20 gezeigt. Die Simulation ist für $6V$ Gatespannung angepaßt worden und führt zu einer mäßigen Übereinstimmung mit der entsprechenden experimentellen Kennlinie. Es war nicht möglich, zugleich sowohl für kleine Drainspannung als auch im Sättigungsbereich die Übereinstimmung zu verbessern. Für die anderen Gatespannungen wurde mit den gleichen Parametern ein enttäuschender Widerspruch erhalten, wie in Abb. 4.20 sichtbar ist. Eine bessere Übereinstimmung könnte nur erzielt werden, wenn man für jede Gatespannung eine andere Zustandsdichte der verteilten

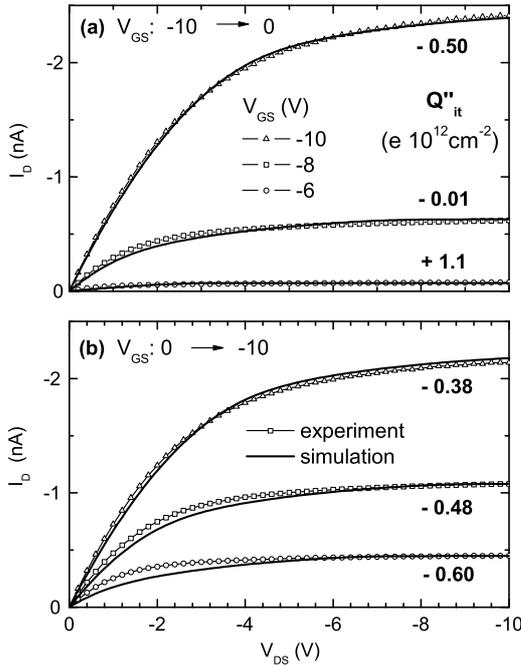


Abbildung 4.21: Gemessene Ausgangskennlinien (mit Symbolen) eines MEH-TPD-PPV OFET für variable Gatespannungen entsprechend $V_{GS} = -10(2)0\text{V}$ (a) und $V_{GS} = 0(-2) - 10\text{V}$ (b) gemeinsam mit Simulationen unter Annahme von umladbaren Grenzflächenzuständen und Grenzflächenladungen (Q''_{it} , pro Fläche), Abhängigkeit von Gate-spannung und Sweep-Richtung wie angegeben.

Traps annimmt. Eine solche Annahme wäre ziemlich merkwürdig. Aufgrund der Dominanz der Hysterese ist folglich ein signifikanter Test der Anwendbarkeit dieses Modells kaum möglich. Die Anwendung der einfachsten Konsequenz, ausgedrückt durch Gleichung (4.2), ist daher ebenfalls fraglich.

Jedoch wurde die Hysterese zusätzlich auch mittels Kapazitäts-Spannungs-Messungen an MOS-Kondensatoren studiert, welche in der gleichen technologischen Sequenz präpariert wurden wie die Transistoren [36, 88]. Diese Messungen haben deutlich gezeigt, dass die Hysterese grob durch eine Abhängigkeit der Schwellspannung von der Gatespannung und von der Sweep-Richtung beschrieben werden kann. Eine solche Verschiebung der Schwellspannung kann durch eine veränderliche Grenzflächenladung verursacht werden. Diese Annahme ist in den in Abb. 4.21 gezeigten Simulationen realisiert worden für beide Sweep-Richtungen und im Vergleich zu den experimentellen Daten. Ein trap-freies Material mit folgenden Parametern wurde betrachtet: Grunddotierung $N_A^- = 10^{16} \text{cm}^{-3}$, konstante Beweglichkeit $\mu_n = \mu_p = 5.5 \times 10^{-5} \text{cm}^2/\text{Vs}$. An der Isolatorgrenzfläche ist die Existenz einer Nettogrenzflächenladung (pro Fläche) Q''_{it} angenommen worden. Zusätzlich wurde noch das Vorhandensein von donatorartigen Grenzflächenzuständen mit einer Konzentration von $N_{it} = 2.3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ angenommen, welche mit einem energetischen Abstand von $E_t - E_V = 0.25 \text{eV}$ von der Valenzbandkante entfernt liegen. Sie liefern den weichen Übergang in die Sättigung und den leichten Anstieg des Stromes im Sättigungsbereich. Die Grenzflächenladung wurde hingegen angepaßt (Werte sind in Abb. 4.21 angegeben), um die Simulation den experimentellen Kennlinien in Abhängigkeit von Gatespannung und Sweep-Richtung anzupassen. Im Vergleich zu Abb. 4.20 ist nun eine befriedigendere Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation in Abb. 4.21 sichtbar. Die gesamte Grenzflächenladung bestehend aus Q''_{it} und dem Anteil der ionisierten Donatoren (Grenzflächenzustände) ist stets po-

sitiv, wenn eine negative Gatespannung angelegt ist. Die Gesamtladung ändert sich zeitlich entsprechend der Sequenz der Gatespannungen, jedoch mit beachtlicher Zeitverzögerung insbesondere zu Beginn, wenn die Gatespannung auf -10V geschaltet wird. Ein möglicher Mechanismus ist der folgende. Die Nettogrenzflächenladung besteht aus einer fixierten positiven Ladung und negativen beweglichen Gegenionen, welche an diese gebunden sind, zum Beispiel als eine Art Komplex. Die negativen Ionen können aufgrund der angelegten Gatespannung teilweise entfernt werden und die zeitliche Relaxation ist eine Folge der Kinetik der Komplexbildung. Es sind jedoch noch mehr detaillierte experimentelle Ergebnisse und deren Auswertung für eine entscheidende Aufklärung des Ursprungs der Hysterese erforderlich.

4.5 Zusammenfassung

Es existieren recht verschiedene Modelle für die Energiespektren organischer Materialien, welche von potentiellen Interesse für organische Bauelemente sind oder tatsächlich genutzt werden. Aufgrund der großen Vielfalt an Materialien könnten auch recht verschiedene Spektren auftreten, wie zum Beispiel gaußsche oder exponentielle Verteilung von Transportzuständen. Eine andere Möglichkeit ist das Auftreten exponentiell verteilter Traps in der Bandlücke, wie es für a-Si bekannt ist. Es wurde in der Literatur vermutet, dass ein solches Modell für die Modellierung von OFETs relevant sein sollte. In diesem Kapitel wurden in einer detaillierten Simulationsstudie die Eigenheiten von Strom-Spannungs-Kennlinien aufgezeigt, welche durch eine solche Trapverteilung verursacht werden. Sie sind zum großen Teil ebenfalls sowohl von der Art des Kontaktes zwischen Source/Drain und der aktiven Schicht als auch von der Geometrie des OFET, entweder TOC oder BOC, abhängig.

Experimentell wird man versuchen, ohmsche Kontakte herzustellen (oder Anreicherungskontakte). In diesem Fall führt die Berücksichtigung einer Trapverteilung zu niedrigeren Strömen, da unbewegliche getrappte Ladungen Teil der Anreicherungsschicht sind. Der Unterschied zwischen TOC- und BOC-Strukturen ist recht klein. Mit zunehmender Trapkonzentration kommt es zu einer fortschreitenden Erniedrigung des Stromes. Qualitativ erhält man eine quadratische Abhängigkeit des Sättigungsstromes von der Gatespannung und ein lineares Verhalten im aktiven Bereich, beides wie im trap-freien Fall. Die Einsatzspannung steigt mit zunehmender Trapkonzentration an und man hat ebenfalls ein Ansteigen des inversen Subthreshold-Anstieges. Beide Effekte treten auch für ein einzelnes Trapniveau auf. Vom Erscheinungsbild der Transistorkennlinien kann man folglich kaum eine entscheidende Schlußfolgerung über die Existenz einer Trapverteilung ziehen. Der analytische Ausdruck für die effektive Beweglichkeit gemäß dem a-Si-Dünnschicht-Transistor-Modell ist grob innerhalb eines Fehlers von 20% erfüllt. Verglichen mit der time-of-flight-Beweglichkeit ist die sogenannte Feldeffekt-Beweglichkeit, welche aus den Strom-Spannungs-Kennlinien extrahiert wird, jedoch möglicherweise auch anderer Gründe wegen niedriger, zum Beispiel aufgrund der Verminderung möglicher Hopping-Pfade infolge der starken Einengung der Anreicherungsschicht.

Für niedrigere Source/Drain Austrittsarbeiten werden die Kontakte nicht ohmsch. Das führt zu einigen interessanten Eigenheiten, jedoch treten diese auch im trap-freien Fall auf. Natürlich ergeben sich wiederum niedrigere Ströme, falls ei-

ne Trapverteilung vorhanden ist. In diesem Fall einer niedrigen Source/Drain Austrittsarbeit treten signifikante Unterschiede zwischen den beiden Strukturen auf. Der Strom der BOC-Struktur ist um Größenordnungen niedriger als in der TOC-Struktur aufgrund des Schottky-Kontaktes für die beweglichen Ladungsträger in der BOC-Struktur. In beiden Fällen ergibt sich eine nicht-quadratische (nicht-lineare) Abhängigkeit des Stromes von der Gatespannung im Sättigungs- (aktiven) Bereich. In der TOC-Struktur resultiert die geringe Abhängigkeit von der Gatespannung im aktiven Bereich und ein scharfer Übergang in den Sättigungsbereich aus dem ohmschen Widerstand des Gebietes zwischen dem Sourcekontakt und dem Kanal.

In gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinien sind die meisten Merkmale oft durch die starken Hystereseeffekte maskiert. Dies ist ebenfalls für das gefertigte MEH-TPD-PPV-Bauelement der Fall. Der Versuch, die gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinien durch Annahme der Existenz einer Trapverteilung zu modellieren, mißlang aufgrund der Dominanz der Hysterese. Eine eher befriedigende Anpassung für das System wurde ohne Trapverteilung erhalten, allerdings mit der Annahme von Grenzflächentraps und Grenzflächenladungen, wobei letztere sowohl von der Gatespannung als auch deren Sweep-Richtung abhängig sind. Diese Abhängigkeit wäre verständlich, wenn man bewegliche Gegenionen hat, die einer Komplexbildungsreaktion an der Grenzfläche unterliegen.

Von Hysteresen abgesehen, wird in Publikationen oft nur ein einziges Transportmodell betrachtet mit dem vorliegende experimentelle Daten angepaßt werden. Dabei wäre die Eindeutigkeit gezogener Schlußfolgerungen eine interessante Fragestellung. Experimentelle Messungen liegen oft nur in einem begrenzten Parameterbereich vor und verschiedene Modelle können zudem ähnliche Abhängigkeiten liefern. Mittels Simulation könnten entsprechende Datensätze, zum Beispiel die Temperaturabhängigkeit der Feldeffekt-Beweglichkeit, generiert werden, bei welchen somit der zugrundeliegende Transportmechanismus bekannt ist. Anschließend könnte man versuchen, diese Daten mit verschiedenen Modellen anzupassen. Diese Vorgehensweise könnte Einsichten darüber liefern, inwieweit eindeutige Aussagen über den zugrundeliegenden Transportmechanismus anhand einer einzelnen gemessenen Abhängigkeit überhaupt möglich sind. Möglicherweise ist dafür neben der $\mu(T)$ -Abhängigkeit eine zusätzliche unabhängige Messung der Zustandsdichte nötig.

Kapitel 5

Source-Gated Dünnschicht - Transistoren (SGT)

Von jeher besteht die Anforderung, die Leistung eines Transistors zu verbessern, wie zum Beispiel schnellere Reaktionszeiten, niedrigerer Leistungsverbrauch, zuverlässigere Arbeitsweise, höhere Belastbarkeit oder niedrigere Herstellungskosten. Als ein Vorschlag ist kürzlich der source-gated Dünnschicht-Transistor (SGT) aus undotierten a-Si:H eingeführt worden [92–94]. Im SGT gibt es keinen direkten Kontakt zwischen dem Sourcekontakt und dem Kanal. Zusätzlich wurde ein Schottky-Barrieren Sourcekontakt und ein ohmscher Drainkontakt verwendet, anstatt der üblichen ohmschen Kontakte zum Kanal für Drain als auch für Source. Grundverschiedene Strom-Spannungs-Kennlinien wurden im Vergleich zum konventionellen Dünnschicht-Feldeffekt-Transistor erhalten. In Ref. [92, 93] wurde eine qualitative Beschreibung der Arbeitsweise dieses Bauelementes vorgeschlagen mit dem Hauptmerkmal, dass die Gateelektrode die Zufuhr von Ladungsträgern steuert und der Strom sättigt, wenn das Sourcegebiet an Ladungsträgern verarmt ist. Das ist im Gegensatz zum Bauelement mit ohmschen Kontakten, wo der Strom sättigt, wenn Drain an Ladungsträgern verarmt wird. Nach Ref. [92, 93] kann der SGT bei niedrigeren Spannungen mit größerer Verstärkung und niedrigerer Verlustleistung betrieben werden und seine Kennlinien bleiben bei kleineren Abmessungen erhalten.

Abgesehen von der Ausdehnung der Gateelektrode entspricht die Geometrie des top-Kontakt-Transistors (TOC) im wesentlichen der des SGTs. Obwohl ohmsche Source-/Drainkontakte als günstiger betrachtet werden, können Materialkombinationen und Technologie zu Schottky-Kontakten führen. In diesem Fall ist der TOC TFT dem SGT ähnlich. Im SGT ist Drain als ohmsch gewählt. Ein Schottky-Kontakt für Drain ist jedoch während des Betriebs in Durchlaßrichtung gepolt und wird den Strom nicht wesentlich limitieren. Daher sollte man ähnliche Eigenschaften dieser beiden Bauelemente erwarten.

Im vorherigen Kapitel 4 ([E3,E5]) ist eine umfassende Simulationsstudie von BOC und TOC OFETs durchgeführt worden, wobei sowohl ohmsche Kontakte als auch Verarmungskontakte für Source/Drain berücksichtigt wurden. Ferner ist das a-Si-Modell angepaßt worden, als ein mögliches Modell zur Beschreibung von OFETs. Das heißt, exponentielle Trapverteilungen innerhalb der Bandlücke sind in Betracht gezogen worden. Offensichtlich unterscheidet sich dieses Modell vom SGT nur durch die Asymmetrie der Source-/Drainkontakte beim SGT sowie durch Materialparame-

ter wie Bandlücke, Beweglichkeit, etc. Im Fall der Schottky-Source TOC-Struktur aus Kapitel 4 gleichen die simulierten Strom-Spannungs-Kennlinien den gemessenen SGT-Kennlinien. Die Betrachtung der internen Feld- und Konzentrationsabhängigkeiten führte jedoch auf eine andere Interpretation der Arbeitsweise dieses Bauelementes, als sie in Ref. [92] für den SGT vorgeschlagen wurde. Das Hauptmerkmal des Schottky-Source TOC FET ist ein stark reduzierter Strom aufgrund des Serienwiderstandes zwischen Source und dem Kanal.

Da einige Unterschiede zwischen beiden Bauelementen, dem Schottky-Source TOC-Transistor aus Kapitel 4 einerseits und dem SGT andererseits, verbleiben, wurden hier numerische zwei-dimensionale (2D) Simulationen speziell für den SGT basierend auf a-Si:H durchgeführt ([E6]), wie er in Ref. [92] vorgestellt wurde. Die simulierten Kennlinien weisen die gleichen Eigenarten auf wie die gemessenen Kennlinien. Simulierte Feld- und Konzentrationsabhängigkeiten offenbaren die tatsächliche Arbeitsweise des Bauelementes und mögliche Vorteile oder Nachteile werden erörtert.

5.1 Eigenschaften und vorgeschlagene Arbeitsweise

Shannon und Gerstner [92, 93] fertigten SGTs unter Einsatz von undotierten a-Si:H mit einer Dicke von 100nm als aktive Schicht und Siliziumnitrid als Isolator mit einer Dicke von 300nm. Abgesehen von einem zusätzlichen Feld-Relief ist das der Querschnitt (Fig. 3 in Ref. [92]), welcher weiter unten in den Simulationen verwendet wird und in Abb. 5.1 dargestellt ist. Im Gegensatz zum konventionellen Dünnschicht-Transistor ist im SGT das Source-Kontaktmaterial so gewählt, dass es einen Schottky-Kontakt zur Schicht bildet. Das ist unter Einsatz von Chrom (mit einer Austrittsarbeit von 4.5eV) erreicht worden. Das verwendete Drain-Kontaktmaterial wurde nicht erwähnt, allerdings sollte dessen Austrittsarbeit nicht viel größer als 4.0eV sein, um einen guten ohmschen Kontakt zum n-Kanal¹ in der a-Si:H-Schicht mit einer Elektronenaffinität von $\chi = 4.0\text{eV}$ zu erhalten. Weiterhin befindet sich der Gatekontakt direkt oberhalb (oder unterhalb) des Sourcegebietes. Das ist üblicherweise ebenfalls in vielen organischen TFTs realisiert, wo sich das Gate nicht nur oberhalb (oder unterhalb) des Kanalgebietes befindet, sondern auch über die Source- und Drainkontakte ausgedehnt ist. Dies ist eigentlich für den Betrieb des Bauelementes nicht notwendig und ergibt unvorteilhafte Überlappkapazitäten, welche die Grenzfrequenz reduzieren. Im SGT aus Ref. [92] ist das Gate nicht oberhalb oder unterhalb des Draingebietes ausgedehnt, allerdings erstreckt es sich in den Bereich des Kanalgebietes (andernfalls würde ein parasitärer Widerstand auftreten). Das eingesetzte Gate-Kontaktmaterial wurde nicht erwähnt.

In Ref. [92] werden gemessene Ausgangskennlinien des SGT mit einem Schottky-Kontakt als Source verglichen mit einem konventionellen Feldeffekt-Transistor (FET) mit ohmschen Sourcekontakt (Fig. 4 des Artikels). Weiterhin wurden verschiedene

¹Ein p-Kanal unter Einsatz von Siliziumnitrid als Isolator ist nicht beobachtet worden aufgrund der inhärent fixierten positiven Ladung in SiN_x Isolatoren, was eine Ausbildung des p-Kanals für negative Gatespannungen verhindert [95].

Bauelemente mit variabler Kanallänge L und Kanalweite w hergestellt. Der Drainstrom des FET skaliert mit w/L und der Sättigungsstrom steigt quadratisch mit zunehmender Gatespannung an, wie man es gemäß der Shockley-(Sah-) Gleichung erwartet. Im Gegensatz dazu wurden für den SGT völlig unterschiedliche Kennlinien gemessen. Der Drainstrom skaliert hier nur mit der Kanalweite w und er war unabhängig von der Kanallänge L , zumindest bis zur kleinsten gefertigten von etwa 2 Mikrometer. Außerdem sättigt der Drainstrom abrupt bei viel niedrigeren Drainspannungen und der Sättigungsstrom steigt (nahezu) linear mit zunehmender Gatespannung an. Man sollte erwähnen, dass dieses Verhalten mit einem niedrigeren Drainstrom verbunden ist.

Shannon und Gerstner erklärten den Ursprung der beobachteten Eigenarten des SGT folgendermaßen. Eine positive Gate-Source-Spannung führt zur Elektronenanreicherung an der Halbleiter-Isolator Grenzfläche. Eine zusätzliche kleine positive Drain-Source-Spannung polt den Source Schottky-Kontakt in Sperrichtung und ein Strom fließt über die Potentialbarriere nach Drain. Mit steigender Drain-Source-Spannung dehnt sich die Verarmungsschicht bei Source aus und schließlich wird das Halbleitergebiet zwischen Source und dem Gateisolator an Ladungsträgern verarmt. Wenn das geschieht, sättigt der Strom, da das elektrische Feld an der Source-Barriere allein durch die Spannung festgelegt ist, welche am Gatekontakt angelegt wird. Im Bereich der Stromsättigung verhalten sich der Isolator und das Halbleitergebiet zwischen Source und dem Isolator wie zwei Dielektrika in Serie und daher erhält man eine lineare Beziehung zwischen angelegter Gatespannung und elektrischen Feld an der Source-Barriere. Die Änderung des Drainstromes bei einer bestimmten angelegten Drainspannung (oberhalb der Sättigung) steht nun in Beziehung zu thermionischer Feldemission über die sperrgepolte Source-Barriere, der funktionalen Abhängigkeit zwischen elektrischen Feld und Sperrstrom einer Schottky-Barriere [96]. Folglich wird vermutet, dass der Feldeffekt genutzt wird, die effektive Höhe der Source-Barriere infolge eines Tunnelbeitrages zu ändern. Mit zunehmender Gatespannung steigt die elektrische Feldstärke am Sourcekontakt und führt zu einem zunehmenden Beitrag des Tunnelstromes (geringere effektive Barrierenhöhe) und dadurch nimmt die Größe des Drainstromes zu.

5.2 Simulation: Materialparameter

Der Querschnitt der simulierten Bauelementstruktur ist in Abb. 5.1 gezeigt. Diese modelliert (abgesehen vom Feld-Relief) den experimentell verwendeten SGT [92]. Die aktive Schicht ist undotiertes a-Si mit einer Dicke von 100nm und der Gateisolator besteht aus einer 300nm dicken Siliziumnitrid-Schicht. Die Länge der Source- und Drainkontakte wurde auf $5\mu\text{m}$ begrenzt. Dies beeinflusst nicht die stationären Strom-Spannungs-Kennlinien. Der Gatekontakt befindet sich gegenüber des Source- und des Kanalgebietes, ist jedoch nicht über das Draingebiet ausgedehnt, wie auch in der experimentellen Struktur. Um das Skalierungsverhalten zu überprüfen, wurden zwei verschiedene Kanallängen, $L = 10\mu\text{m}$ und $L = 2\mu\text{m}$, gewählt. In der Simulation beträgt die Kanalweite stets $w = 1\mu\text{m}$, es ist offensichtlich, dass der Strom mit w skaliert.

Die Materialparameter sind folgendermaßen spezifiziert worden. Die Kontakte (Source, Drain, Gate) werden als Metalle beschrieben, welche durch ihre Austrittsarbeit charakterisiert sind. Für den Gatekontakt wurde $\Phi_G = 5.0\text{eV}$ gewählt. Der exakte Wert ist nicht von großer Bedeutung, da im wesentlichen nur die Flachbandspannung und infolgedessen die Schwellspannung beeinflusst werden. Die Austrittsarbeit des Drainkontaktes beträgt stets $\Phi_D = 4.0\text{eV}$, was eine gute Elektroneninjektion ins a-Si gestattet (ohmscher Kontakt). Für den Sourcekontakt sind zwei verschiedene Werte verwendet worden, $\Phi_S = 4.0\text{eV}$ zur Simulation der Kennlinien des FET mit ohmschen Sourcekontakt und $\Phi_S = 4.5\text{eV}$ zur Simulation der Kennlinien des SGT. Letzteres ist die Austrittsarbeit von Chrom, was im Experiment verwendet wurde, um die Source-Barriere zu erzeugen. Die drei Parameter dielektrische Konstante $\epsilon_{\text{SiN}} = 7.5$, Elektronenaffinität $\chi_{\text{SiN}} = 1.65\text{eV}$ und Bandlücke $E_{\text{gSiN}} = 5.4\text{eV}$ des Siliziumnitrid-Isolators sind wesentlich [47,97]. Die Parameter der intrinsischen a-Si-Schicht werden wie folgt gewählt: Elektronenaffinität $\chi = 4.0\text{eV}$ [98], Bandlücke $E_g = 1.72\text{eV}$ [73, 99], dielektrische Konstante $\epsilon = 11.7$, effektive Zustandsdichten $N_C = 2.8 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$ und $N_V = 1.04 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$ (Silizium Werte) [47] und konstante Beweglichkeiten für Elektronen und Löcher $\mu_n = \mu_p = 4\text{cm}^2/\text{Vs}$. Des weiteren liegen in a-Si exponentiell verteilte Trapzustände innerhalb der Bandlücke vor, welche ebenfalls in Betracht gezogen wurden. Deren Verteilung ist durch die Zustandsdichte nach Gleichung (4.1) gegeben und wurde bereits in Kapitel 4 ausführlich besprochen. Die Werte für die Konzentrationen N_0 und die Abfallkonstanten E_S wurden den Referenzen [73], [99] und [100] mit nur unwesentlichen Modifizierungen entnommen: $N_0^{\text{at,tail}} = 5 \times 10^{20}\text{cm}^{-3}(\text{eV})^{-1}$, $E_S^{\text{at,tail}} = 0.023\text{eV}$, $N_0^{\text{at,deep}} = 2 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}(\text{eV})^{-1}$, $E_S^{\text{at,deep}} = 0.08\text{eV}$, $N_0^{\text{dt,tail}} = 3 \times 10^{20}\text{cm}^{-3}(\text{eV})^{-1}$, $E_S^{\text{dt,tail}} = 0.023\text{eV}$, $N_0^{\text{dt,deep}} = 7 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}(\text{eV})^{-1}$, $E_S^{\text{dt,deep}} = 0.1\text{eV}$. Alle Ergebnisse entsprechen einer Temperatur von 300K, die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten betragen: $v_n = 2.573 \times 10^6\text{cm/s}$, $v_p = 1.93 \times 10^6\text{cm/s}$ (Silizium-Werte).

Für die genannten Materialparameter liegt die Fermi-Energie 1.015eV oberhalb vom Valenzband oder 4.705eV unterhalb vom Vakuum-Niveau. Die entsprechenden intrinsischen Dichten der getrapten positiven und negativen Ladungen sind $2.6 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$, die bewegliche Elektronendichte beträgt $n = 4.2 \times 10^7\text{cm}^{-3}$ und es gilt $p \ll n$. Am Sourcekontakt mit der Austrittsarbeit $\Phi_S = 4.5\text{eV}$ hat man $n = 10^{11}\text{cm}^{-3}$ und eine Dichte negativ geladener Traps von $3.6 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$, wohingegen die entsprechenden Lochdichten vernachlässigbar sind. Folglich tritt im Vergleich zum intrinsischen Material eine Elektronenanreicherung am Kontakt auf. Die Elektronenkonzentration ist jedoch so gering, dass eigentlich die Situation einer Verarmung vorliegt, insbesondere verglichen mit der hohen Elektronenkonzentration in der Anreicherungsschicht (bis zu $\approx 10^{17}\text{cm}^{-3}$, die getrapte Anreicherungsdichte ist sogar größer).

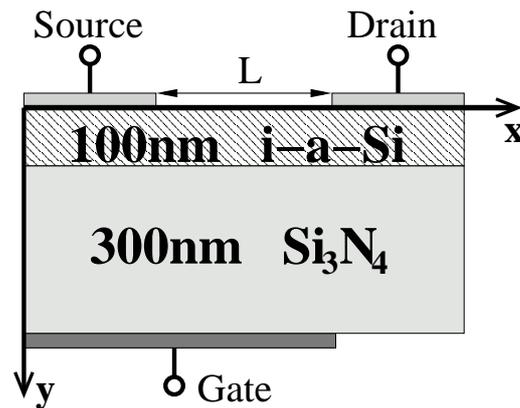


Abbildung 5.1: Simulierte Bauelementstruktur

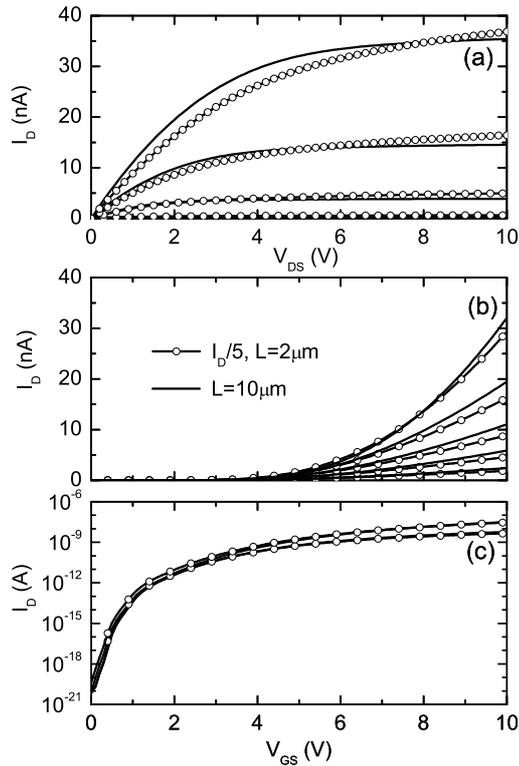


Abbildung 5.2: Simulierte Strom-Spannungs-Kennlinien bei einem ohmschen Sourcekontakt ($\Phi_S = 4.0\text{eV}$) und den Kanallängen $2\mu\text{m}$ und $10\mu\text{m}$, der Strom für den kürzeren Kanal wurde um einen Faktor 5 herabgesetzt: Ausgangskennlinien (Gatespannung $V_{GS} = 4(2)10\text{V}$) (a), Transferkennlinien (Drainspannung $V_{DS} = 0.2, 0.5, 1, 2, 5\text{V}$) (b) und Transferkennlinien in logarithmischer Auftragung (Drainspannung $V_{DS} = 0.5, 5\text{V}$) (c). Man beachte, dass I_D der simulierte Strom pro $1\mu\text{m}$ Kanalweite ist.

5.3 Simulation: Ergebnisse und Diskussion

Zunächst sollen die Eigenschaften des in Abb. 5.1 dargestellten Transistors für den Fall eines ohmschen Sourcekontaktes (für Elektronen) zur aktiven Schicht diskutiert werden, das heißt für eine Austrittsarbeit von $\Phi_S = 4.0\text{eV}$ des Source-Kontaktmaterials. Die Strom-Spannungs-Kennlinien dieses Transistors sind in Abb. 5.2 für zwei verschiedene Kanallängen, $L = 10\mu\text{m}$ und $L = 2\mu\text{m}$, gezeigt. Um das Skalierungsverhalten zu veranschaulichen, wurde der Strom im Fall des kürzeren Kanals durch 5 dividiert. Die Ausgangskennlinien in Abb. 5.2a zeigen das gewöhnlich Verhalten eines konventionellen FET, das heißt eine quadratische Abhängigkeit des Sättigungsstromes I_D von der Gatespannung V_{GS} und eine nahezu lineare Abhängigkeit im aktiven Bereich. Die Skalierung mit der Kanallänge ist klar erkennbar, jedoch tritt für die kürzere Kanallänge $L = 2\mu\text{m}$ keine deutliche Stromsättigung auf. Ein solches Verhalten kann entweder durch Umladung von Traps verursacht werden, wenn das Draingebiet mit zunehmender Drainspannung V_{DS} verarmt wird [E5] oder es tritt aufgrund von Kurzkanaleffekten auf (Drain-induzierte Barrierenerniedrigung, jüngste Simulationen siehe z.B. [46]). Letzteres erscheint zunächst weniger wahrscheinlich, da aufgrund der großen dielektrischen Konstante von Siliziumnitrid die äquivalente Siliziumdioxid-Isolatordicke $d_{\text{SiO}_2}^{\text{equiv.}} = 156\text{nm}$ selbst im Vergleich zur kürzeren Kanallänge immer noch klein ist. Berechnete Potentialprofile zeigen jedoch deutlich, dass Drain-induzierte Barrierenerniedrigung, also ein typischer Kurzkanaleffekt, im Transistor mit $2\mu\text{m}$ Kanallänge auftritt: Abb. 5.3 zeigt den Potentialverlauf für beide Kanallängen am source-seitigen Ende des Kanals, das

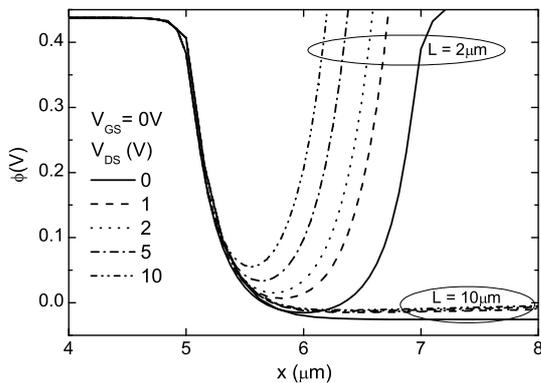


Abbildung 5.3: Potentialverlauf im Kanalbereich 1nm oberhalb der Oxidgrenzfläche am source-seitigen Ende für zwei Kanallängen $L = 10\mu\text{m}$ und $L = 2\mu\text{m}$. Gatespannung $V_{GS} = 0\text{V}$ (Transistor ausgeschaltet) und variable Drainspannung, $\Phi_D = \Phi_S = 4.0\text{eV}$.

heißt 1nm oberhalb der Oxidgrenzfläche. Der Sourcekontakt endet bei $x = 5\mu\text{m}$ an der gegenüberliegenden Seite der aktiven Schicht. Dabei beträgt die Gatespannung $V_{GS} = 0\text{V}$ (ausgeschalteter Transistor) und die Drainspannung V_{DS} wird variiert. Im Fall der größeren Kanallänge beeinflusst die anliegende Drainspannung nicht den Verlauf des Potentials am source-seitigen Kanallende. Für die kleinere Kanallänge hingegen, ist ein deutlicher Einfluß zu sehen. Mit zunehmender Drainspannung wird die Barriere (für Elektroneninjektion in den Kanalbereich) nahe Source mehr und mehr reduziert. Die entsprechende Verschiebung der Schwellspannung führt dann zum Ansteigen des Stromes im Sättigungsbereich. Dieser Effekt tritt hier aufgrund der vorhandenen Trapverteilung im Material schon bei relativ großen Kanallängen in Erscheinung. Da die Abfallkonstante der Verteilung größer ist als kT , ist auch die Ausdehnung von Raumladungszonen dementsprechend größer. Sind also Trapverteilungen vorhanden, muss man schon bei größeren Strukturen als gewohnt mit Kurzkanaleffekten rechnen.

Wären die Kennlinien aus Abb. 5.2a gemessen, könnte man zur annähernden Parameterextraktion im Fall des Langkanal-Transistors die Shockley-Formel (2.1) verwenden. Jedoch müssen noch zwei Eigenheiten berücksichtigt werden, beide stehen in Zusammenhang mit der vorhandenen Trapverteilung. Zunächst sind die vom Feld induzierten Ladungen in bewegliche und getrappte Ladungsträger unterteilt. Folglich ist der Strom aufgrund der reduzierten Dichte beweglicher Ladungsträger niedriger als im trap-freien Fall. Dieser Effekt wird formal mit einer niedrigeren effektiven Beweglichkeit μ_{eff} beschrieben, welche näherungsweise durch Gleichung (4.2) gegeben ist [73]. Daher muß die Beweglichkeit μ (Eingabe für die Simulation, $\mu_0 = \mu$) in den Gleichungen (2.1) durch eine effektive Beweglichkeit μ_{eff} ersetzt werden, welche selbst wiederum von der Gatespannung abhängig ist. Ein zweiter Effekt ist mit der top-Kontakt-Struktur verbunden, welche keinen direkten Kontakt zwischen Source/Drain und dem durch die Gatespannung induzierten Anreicherungskanal besitzt. In den Bereichen der Source- und Drainkontakte fließt der Strom senkrecht zur a-Si-Schicht, was zu einem Serienwiderstand führt. Aufgrund des intrinsischen Materials und insbesondere aufgrund der Trapzustände liegt in diesen Bereichen eine niedrige Konzentration beweglicher Ladungsträger vor, weshalb der Serienwiderstand groß ist und die Kennlinien deutlich beeinflusst. Demzufolge wird der Strom erniedrigt, sowohl im aktiven als auch im Sättigungsbereich. Diese Erniedrigung ist ebenfalls von

der Gatespannung abhängig. Unter Berücksichtigung dieser beiden Effekte kann man die simulierten Ausgangskennlinien durch die Gleichungen (2.1) unter Verwendung einer von der Gatespannung abhängigen Beweglichkeit

$$\mu_{\text{eff}}^{\gamma} = \gamma \mu_{\text{eff}} \quad (5.1)$$

beschreiben, wobei $\gamma = \gamma(V_{\text{GS}}) < 1$ ist, verursacht durch den zweiten Effekt verbunden mit dem Serienwiderstand zwischen Source und dem Kanal.

Auf den ersten Blick erscheinen die Transferkennlinien (Abb. 5.2b) ganz normal. Der Strom steigt zunächst quadratisch und dann (nahezu) linear mit zunehmender Gatespannung, wobei die Ströme für den kürzeren Kanal größer sind. Die Einsatzspannung beträgt etwa 3.2V. Für größere Gatespannungen ist die Abhängigkeit von der Gatespannung jedoch eigentlich nicht linear, es bleibt eine positive Krümmung. Diese supra-lineare Abhängigkeit wird verursacht durch die Gate-spannungsabhängigkeit der effektiven Beweglichkeit (Gleichungen (4.2), (5.1)). Die Transferkennlinien in logarithmischer Auftragung zeigen das Subthreshold-Verhalten (Abb. 5.2c). Für Gatespannungen nahe 0V beträgt der inverse Subthreshold-Anstieg etwa $S \approx 100\text{mV/dec}$, doch dann nimmt dieser aufgrund des Einflusses der Traps zu. Solche Effekte sind zum Beispiel in den Referenzen [39,67] und in Kapitel 4 ([E5]) diskutiert worden. In konventionellen MOS-Transistoren ist der inverse Subthreshold-Anstieg durch $S = dV_{\text{GS}}/d(\log I_{\text{D}}) = (kT/e)\ln 10 [1 + C_{\text{d}}/C_{\text{ox}}]$ mit der Verarmungskapazität C_{d} gegeben [47]. Da für i-a-Si die Verarmungslänge viel größer ist als die Schichtdicke von 100nm, ist die Schicht vollständig verarmt. Die Verarmungskapazität C_{d} muß hier Null gesetzt werden: es bleibt mit $S = (kT/e)\ln 10 \approx 60\text{mV/dec}$ der ideale Wert bei Raumtemperatur. Diese analytische Abschätzung liegt etwas unterhalb des simulierten Wertes aufgrund der nicht planaren Anordnung von Source, Kanal und Drain im simulierten Bauelement. Außerdem verbleibt eine schwache Abhängigkeit des Subthreshold-Stromes von der Drainspannung im Fall der kleineren Kanallänge infolge des bereits erwähnten Kurzkanal-Effektes. Folglich, obwohl die Strom-Spannungs-Kennlinien scheinbar wie die eines konventionellen FET aussehen, gibt es verschiedene Eigenheiten, welche erstens durch das Vorhandensein der exponentiell verteilten Trapzustände und zweitens durch den Serienwiderstand zwischen Source und dem Kanal verursacht werden.

Um die Kennlinien des SGT zu simulieren, muß man Source als Schottky-Kontakt modellieren. Das wird mit einer Austrittsarbeit von $\Phi_{\text{S}} = 4.5\text{eV}$ für das Source-Kontaktmaterial erreicht, während alle anderen Parameter unverändert bleiben. Die entsprechenden Strom-Spannungs-Kennlinien sind in Abb. 5.4 dargestellt und es werden wiederum die zwei Werte der Kanallänge $L = 10\mu\text{m}$ und $L = 2\mu\text{m}$ verglichen. Man beachte, dass der Strom für den kürzeren Kanal hier nicht durch 5 dividiert wurde. In diesem Fall erhält man Strom-Spannungs-Kennlinien mit folgenden Eigenheiten: (i) Die Ströme sind viel niedriger, z.B. für den Transistor mit $L = 10\mu\text{m}$ bei $V_{\text{GS}} = 10\text{V}$ in Sättigung etwa um einen Faktor 100. Aufgrund der gänzlich unterschiedlichen Abhängigkeiten von den beiden Spannungen und der Kanallänge gibt es keine gleich bleibende Skalierung. (ii) Auffällig ist der abrupte Übergang der Ausgangskennlinien (Abb. 5.4a) in die Sättigung, der (iii) bei niedriger Drainspannung eintritt. (iv) Der Sättigungsstrom hängt für größere Drainspannungen nahezu linear von der Gatespannung ab, ausgenommen nahe der Einsatzspannung (Abbn. 5.4a und 5.4b), wo die Abhängigkeit mehr quadratisch ist. Diese lineare Abhängigkeit ist

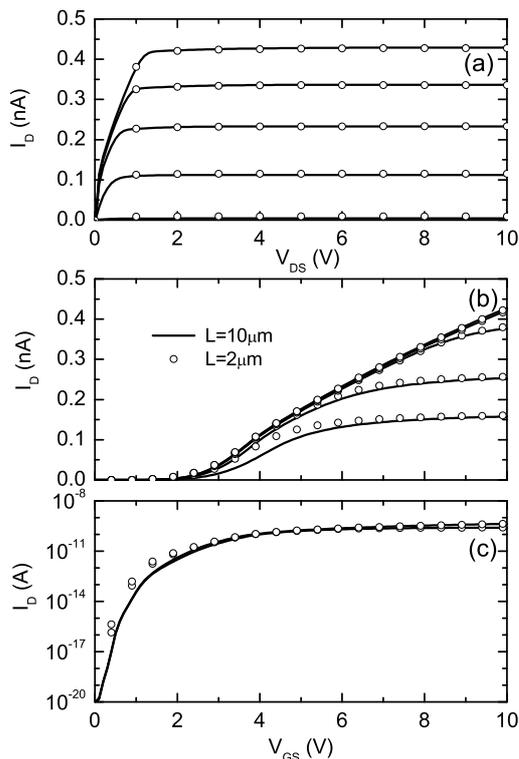


Abbildung 5.4: Simulierte Strom-Spannungs-Kennlinien für einen Schottky-Sourcekontakt ($\Phi_S = 4.5eV$) und zwei Kanallängen $2\mu m$ und $10\mu m$ (Ströme nahezu unabhängig von der Kanallänge): Ausgangskennlinien (Gatespannung $V_{GS} = 4(2)10V$) (a), Transferkennlinien (Drainspannung $V_{DS} = 0.2, 0.5, 1, 2, 5V$) (b) und Transferkennlinien in logarithmischer Auftragung (Drainspannung $V_{DS} = 0.5, 5V$) (c).

im Gegensatz zur gewöhnlichen quadratischen. (v) Für niedrige Drainspannungen ist der Strom nahezu unabhängig von der angelegten Gatespannung, das bedeutet, der Strom kann in einem Bereich nicht durch die Gatespannung gesteuert werden, welcher üblicherweise der aktive Bereich ist. Folglich werden die Transferkennlinien (Abb. 5.4b) für kleine Drainspannungen und große Gatespannungen nahezu unabhängig von der Gatespannung, wie von den Ausgangskennlinien her erwartet. (vi) Des Weiteren sind die Kennlinien nicht von der Kanallänge abhängig, ausgenommen bei sehr niedriger Gatespannung (Abb. 5.4c). Die Einsatzspannung beträgt etwa 2V. Das Subthreshold-Verhalten ist in Abb. 5.4c gezeigt. Für Gatespannungen nahe 0V beträgt der inverse Subthreshold-Anstieg ungefähr 110mV/dec. Eine schwache Abhängigkeit von der Kanallänge ist bis zu Gatespannungen von $\approx 3V$ sichtbar.

Ein Vergleich mit den in Ref. [92] vorgestellten experimentellen Daten ist für den Transistor mit ohmschen Sourcekontakt kaum möglich, da Details für den „konventionellen FET betrieben bei vergleichbarem Strom-Level“ (Ausgangskennlinien in Fig. 4b von Ref. [92]) fehlen. Für den SGT können die simulierten Ausgangskennlinien (Abb. 5.4a) jedoch direkt mit den experimentellen (Fig. 4a von Ref. [92]) verglichen werden, wenn man berücksichtigt, dass die Kanalweite im Experiment $600\mu m$ beträgt. Korrigiert man den simulierten Strom, so beträgt dieser zum Beispiel in Sättigung bei 10V Gatespannung $2.57 \times 10^{-7}A$, während gemäß Fig. 4a von Ref. [92] der experimentelle Wert etwa $2.35 \times 10^{-7}A$ beträgt. Eine derartige (kleine) Abweichung ist nicht überraschend, da der Wert für die Beweglichkeit nicht zur Anpassung der Daten angeglichen wurde. Außerdem könnte auch die verwendete Gate-Austrittsarbeit von der des gemessenen Transistors abweichen, wie bereits

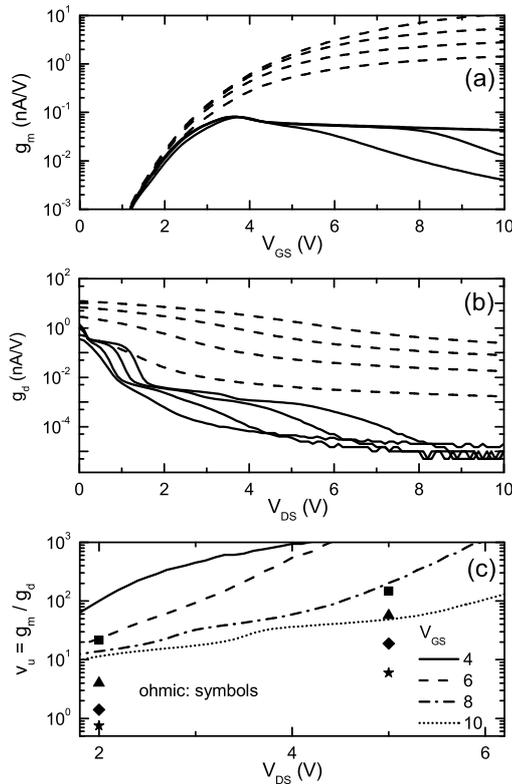


Abbildung 5.5: Steilheit g_m für ohmschen- (gestrichelt) und Schottky-Sourcekontakt (durchgezogen) für Drainspannungen $V_{DS} = 0.5, 1, 2, 5$ V (a), Kanalleitwert g_d für ohmschen- (gestrichelt) und Schottky-Sourcekontakt (durchgezogen) für Gatespannungen $V_{GS} = 4(2)10$ V (b) und Spannungsverstärkung für ohmschen- (Symbole) und Schottky-Sourcekontakt (Linien) für Gatespannungen $V_{GS} = 4(2)10$ V (c). g_m und g_d sind wieder auf $1\mu\text{m}$ Kanalweite bezogen.

erwähnt wurde. Weiterhin sind der scharfe Übergang in die Sättigung bei einer niedrigen Drainspannung von ungefähr 1V, geringfügig mit zunehmender Gatespannung verschoben sowie die nahezu lineare Abhängigkeit des Sättigungsstromes von der Gatespannung qualitativ dieselben. Das ist ebenfalls der Fall für die Einsatzspannung nahe 2V.

In Ref. [92] werden ferner Werte für die Spannungsverstärkung angegeben, welche durch die Steilheit g_m und den Kanalleitwert g_d gemäß $v_u = g_m/g_d$ gegeben ist. Abb. 5.5a und b zeigt g_m und g_d für den Transistor mit $L = 10\mu\text{m}$ sowohl für einen ohmschen Sourcekontakt als auch für den Schottky-Sourcekontakt des SGT (berechnet aus den simulierten Transfer- und Ausgangskennlinien). Aufgrund der supra-linearen Transferkennlinien (verursacht durch die Trapverteilung) erreicht die Steilheit für den Transistor mit den ohmschen Sourcekontakt im normalerweise aktiven Regime keinen Maximalwert bei $(V_{GS} - V_{th}) = V_{DS}$, für den SGT hingegen tritt bei niedriger Gatespannung ein Maximum auf und es ist außerdem für $V_{GS} > 4$ V und $2\text{V} < V_{DS} < 5$ V unabhängig von der Drainspannung und hängt nur schwach von der Gatespannung ab: $(0.073 - 0.003V_{GS}/V)\text{nA/V}$. Des weiteren ist g_m für den SGT kleiner, besonders bei höheren Spannungen bis zu mehreren Größenordnungen. In Bezug auf die Grenzfrequenz $f_0 = g_m/(2\pi C_{GS})$ ist dies ein klarer Nachteil. Außerdem ist die Gate-Source-Kapazität C_{GS} für den SGT infolge des erforderlichen Überlapps von Source und Gate größer, was zu einer zusätzlichen Reduzierung der Grenzfrequenz führt. Der Kanalleitwert g_d verhält sich für den ohmschen Sourcekontakt gewöhnlich, er nimmt mit zunehmender Drainspannung und mit abfallen-

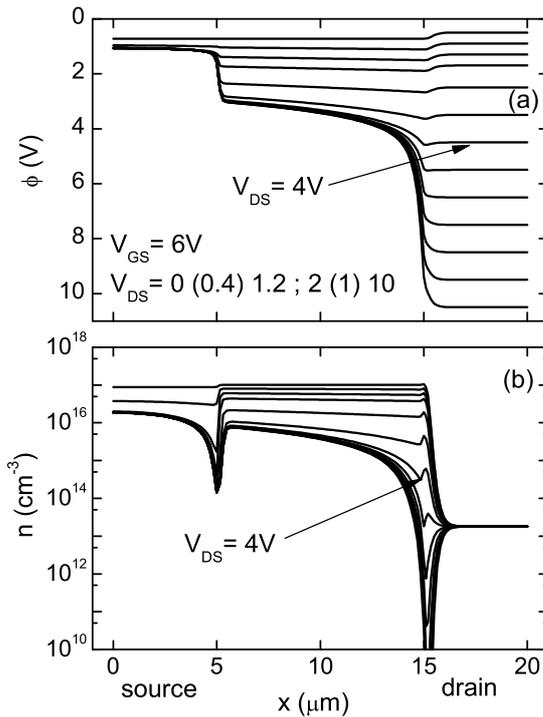


Abbildung 5.6: Elektrisches Potential (a) und bewegliche Elektronendichte (b) 1nm oberhalb der Grenzfläche zum Isolator für die Struktur mit $\Phi_S = 4.5\text{eV}$ und $L = 10\mu\text{m}$. Gatespannung $V_{GS} = 6\text{V}$ und variable Drainspannung $V_{DS} = 0(0.4)1.2\text{V}$ und $2(1)10\text{V}$ von oben beginnend.

der Gatespannung ab. Im Gegensatz dazu hat man für den SGT eine strukturierte Abhängigkeit. Abgesehen vom Abfall unmittelbar bei 0V Drainspannung, tritt ein Plateau auf bis zum Abfall bei der Spannung, wo der Übergang in die Sättigung in den Ausgangskennlinien (Abb. 5.4a) zu sehen ist. Aber bei größeren Drainspannungen tritt ein weiterer Abfall auf ein minimales Plateau auf. Dieses wird gerade bei der Spannung $V_{DS} = V_{GS} - V_{th}$ erreicht, wo man den normalen Übergang in die Sättigung aufgrund der Verarmung bei Drain erwartet. Diese Eigenheit ist nicht direkt in den Ausgangskennlinien sichtbar, aber recht deutlich in deren Ableitung g_d . Der kleinere Wert der Steilheit des SGT wird überkompensiert durch den noch größeren Abfall des Kanalleitwertes. Deshalb ist die Spannungsverstärkung (Abb. 5.5c) tatsächlich im SGT viel größer. (In Abb. 5.5c sind aufgrund der erwähnten speziellen Abhängigkeit der Steilheit des SGT für $V_{GS} > 4\text{V}$ und $2\text{V} < V_{DS} < 5\text{V}$ im Fall des SGT Kurven gegeben, im Fall des ohmschen Sourcekontaktes hingegen wurden nur wenige Punkte aus Steilheit und Kanalleitwert extrahiert.) Offensichtlich hat man in beiden Fällen eine starke Abhängigkeit von beiden Spannungen. Tatsächlich gemessene Werte (wie ein Maximalwert $v_u = 85$ für den SGT [92]) werden durch den Arbeitspunkt bestimmt, welcher durch die Meßschaltung festgelegt wird.

Da die Eigenheiten der gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinien des SGT gut durch die Simulation reproduziert werden, kann die Arbeitsweise dieses Bauelementes durch Untersuchung der internen Feld- und Dichteprofile geklärt werden. Abb. 5.6 zeigt Profile entlang des Kanals 1nm oberhalb der Oxidgrenzfläche für den Transistor mit $L = 10\mu\text{m}$ und dem Schottky-Sourcekontakt ($\Phi_S = 4.5\text{eV}$) bei einer angelegten Gatespannung von 6V und einer Variation der Drainspannung wie angegeben. In Abb. 5.6a ist das elektrische Potential ϕ und in Abb. 5.6b die Dichte der beweglichen Elektronen n dargestellt. Um diese Abhängigkeiten zu verstehen,

sollte man folgendes rekapitulieren: In einen konventionellen FET tritt Sättigung bei $V_{DS} = V_{GS} - V_{th}$ ein. Für größere Drainspannungen variiert das Potential im Kanal nur nahe Drain und bleibt innerhalb des Kanals unverändert, gleichzeitig wird der Kanal nahe Drain verarmt. Für die gegebene Gatespannung und einer Schwellspannung von etwa 2V, wie bereits erwähnt (vergleiche Abb. 5.4b), sollte man die übliche Sättigung für Drainspannungen über 4V erwarten. In der Tat erfolgt für größere zunehmende Drainspannungen der Potentialabfall nur nahe Drain (bei $x = 15\mu\text{m}$) (Abb. 5.6a) und dort wird der Kanal von beweglichen Elektronen verarmt (Abb. 5.6b). Bei dieser Spannung ist offensichtlich keine Besonderheit in den Ausgangskennlinien (Abb. 5.4a), allerdings erreicht dort der Kanalleitwert sein Minimum (vergleiche Abb. 5.5b). Tatsächlich tritt in den Ausgangskennlinien Sättigung schon bei einer viel niedrigeren Drainspannung von etwa 0.8V ein. Dieser frühe Übergang in die Sättigung wird durch die speziellen Verhältnisse im Sourcegebiet verursacht. Für kleine Drainspannungen fällt das Potential fast ausschließlich dort ab und dementsprechend nimmt die Ladungsdichte in diesem Gebiet mit zunehmender Spannung ab. Das bedeutet, es gibt ein ohmsches Gebiet zwischen Source und dem Kanal, was den Strom bei diesen niedrigen Spannungen bestimmt, wie weiter unten noch im Detail besprochen wird. Gleichzeitig ist die Dichte entlang des Kanals (von $x = 5\mu\text{m}$ bis $x = 10\mu\text{m}$) konstant, wobei die Konzentration im gesamten Kanal mit zunehmender Drainspannung abfällt. Die Stufe in der Ladungsdichte bei $x = 5\mu\text{m}$ tritt auf, da diese Stelle gerade gegenüber vom Rand des Sourcekontaktes ist. Der weitere Potentialabfall oberhalb des Übergangs in die Sättigung bei etwa 0.8V bis zum bereits erwähnten Wert $V_{DS} = V_{GS} - V_{th} \approx 4\text{V}$ findet gerade an der Stelle gegenüber dem Rand des Sourcekontaktes statt, während im Kanalbereich der Potentialabfall ziemlich gering und nahezu linear ist (wie im normalen aktiven Bereich eines Feldeffekt-Transistors). Da der Bereich unterhalb von Source ($x \leq 5\mu\text{m}$) teilweise verarmt wird, bleibt unmittelbar rechts von dieser Position die Dichte im Kanalbereich mehr als eine Größenordnung größer mit einer Anreicherungsladungsdichte von $\approx 10^{16}\text{cm}^{-3}$. Dadurch hat man an dieser Stelle einen virtuellen schwachen Schottky-Kontakt. Die niedrige Elektronendichte im Gebiet gegenüber von Drain tritt auf, da sich die Gateelektrode nur bis zum Ort $x = 15\mu\text{m}$ erstreckt. Die negativen getrapten Ladungen (nicht dargestellt) weisen qualitativ die gleiche Abhängigkeit wie die beweglichen Elektronen auf, allerdings mit einer größeren Konzentration.

Für ein detaillierteres Verständnis sollte man nun das Verhalten im Sourcegebiet senkrecht zur a-Si-Schicht zwischen Sourcekontakt und Oxidgrenzfläche näher betrachten. Abb. 5.7 zeigt das Energiebanddiagramm zwischen Source und Gate in der Mitte des Sourcekontaktes ($x = 2.5\mu\text{m}$) für eine angelegte Gatespannung von $V_{GS} = +6\text{V}$. Die Grenzfläche zwischen aktiver Schicht und Gateisolator liegt bei $y = 0.1\mu\text{m}$. Die durchgezogenen Linien entsprechen einer kleinen Drainspannung von $V_{DS} = 0.2\text{V}$ vor dem Übergang in die Sättigung (bei $V_{DS} \approx 0.8\text{V}$) und die gestricheltgepunkteten Linien entsprechen $V_{DS} = 2\text{V}$, d.h. dem Sättigungsbereich. Die Energieskala wurde so gewählt, dass das Vakuumniveau des Source-Kontaktmaterials bei der Energie null liegt, d.h. das Source-Ferminiveau befindet sich bei -4.5eV . Für die Lage des Gate-Ferminiveaus muß man dann die Differenz der Austrittsarbeiten der Kontaktmaterialien berücksichtigen, was eine Kontaktspannung V_{bi} ergibt. Bei einer Gatespannung von 0V sind beide Ferminiveaus ausgeglichen. Hier

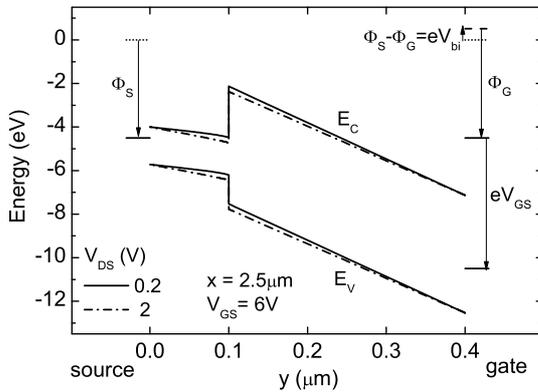


Abbildung 5.7: Energiebänder zwischen Source- und Gatekontakt bei einer Position $x = 2.5\mu\text{m}$. Die angelegte Gatespannung beträgt $V_{GS} = 6\text{V}$. Die durchgezogenen Linien entsprechen einer kleinen angelegten Drainspannung (nicht-Sättigungsbereich) und die gestrichelt-gepunkteten Linien einer ausreichend hohen Drainspannung (Sättigungsbereich). Zusätzlich sind die relevanten Lagen der Kontakt-Energieniveaus eingezeichnet.

beträgt das Kontaktpotential $V_{bi} = -0.5\text{V}$. Wie in der Abbildung zu sehen, reduziert sich der Spannungsabfall über dem Isolator mit zunehmender Drainspannung (bis zur Sättigung) infolge eines zusätzlichen Spannungsabfalls über dem Sourcegebiet. Für die größere Drainspannung wird der Spannungsabfall über der aktiven Schicht scheinbar nahezu linear, was auf vollständige Verarmung zwischen Source und Gateisolator hinweist, wie in Ref. [92] vorhergesagt. Das ist jedoch nicht der Fall. Tatsächlich verbleibt eine Krümmung nahe der Grenzfläche zum Isolator, welche sich bei weiterer Erhöhung der Drainspannung nicht ändert. Allerdings ist es unter der nicht-Gleichgewichtsbedingung (in diesem Fall stationär) mit Stromfluß nicht möglich, allein vom Potential einen Rückschluß über die Dichte zu ziehen: der Logarithmus der Elektronendichte ist proportional zur Differenz von Potential und Quasi-Fermi-Potential.

Die Konsequenzen werden in Abb. 5.8 deutlich, wo das elektrische Potential ϕ , das Quasi-Fermi-Potential für Elektronen ϕ_{Fn} (beide in Abb. 5.8a) und die Dichte der beweglichen Elektronen n (Abb. 5.8b) vom Sourcekontakt zur Gateisolator-Grenzfläche (gleiche Schnittlinie wie in Abb. 5.7) dargestellt sind. Parameter ist die Drainspannung zwischen 0V und 1.4V (Übergang in die Sättigung bei etwa 0.8V). Bei einer Spannung von 0V liegt aufgrund der angelegten Gatespannung Elektronenanreicherung an der Grenzfläche vor. Mit zunehmender Drainspannung (unterhalb 0.8V) tritt ein zusätzlicher Spannungsabfall über dem Sourcegebiet infolge des hohen Widerstandes auf, welcher durch die niedrige Ladungsträgerkonzentration am Sourcekontakt verursacht wird. Folglich nimmt das Potential zu, gleichzeitig nimmt jedoch das Quasi-Fermi-Potential noch stärker zu. Infolgedessen wird das Sourcegebiet zunehmend an Ladungsträgern verarmt, dabei wird die Anreicherungsschicht dünner, aber unmittelbar an der Grenzfläche zum Gateisolator nimmt die Dichte um weniger als eine Dekade ab (an der gewählten Position x). Ein Ansteigen der Drainspannung über 0.8V hinaus führt zu keiner weiteren Änderung der drei Profile. Der weitere Potentialabfall tritt dann mit zunehmender Drainspannung entlang des Kanals auf, wie schon bei Abb. 5.6 beschrieben wurde.

Der maximale Potentialabfall zwischen Grenzfläche und Source (erreicht bei einer

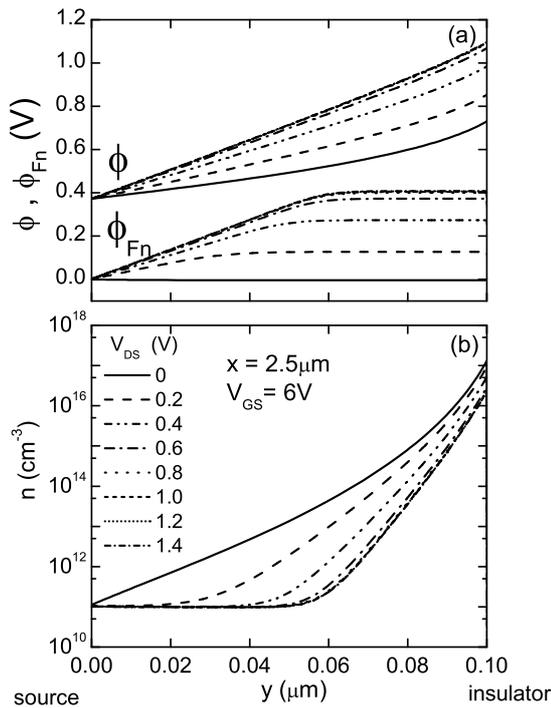


Abbildung 5.8: Elektrische Potential, Quasi-Fermi-Potential für Elektronen (a) und Dichte beweglicher Elektronen (b) im Sourcegebiet senkrecht zum Kanal zwischen Sourcekontakt und Oxidgrenzfläche bei $x = 2.5 \mu\text{m}$. $\Phi_S = 4.5 \text{eV}$, $L = 10 \mu\text{m}$, Gatespannung $V_{GS} = 6 \text{V}$ und variable Drainspannung $V_{DS} = 0(0.2)1.4 \text{V}$.

Drainspannung von etwa 0.8V) beträgt $V_{\perp}^{\text{Si}} = 0.72 \text{V}$. Eine Abschätzung unter Annahme einer vollständig verarmten Schicht folgt aus: $V_{\perp}^{\text{Si}} = V_{GS} / [1 + \epsilon_{\text{Si}} d_{\text{SiN}} / \epsilon_{\text{SiN}} d_{\text{Si}}] = 0.176 V_{GS}$. Im Fall der betrachteten Gatespannung von $V_{GS} = 6 \text{V}$ erhält man 1.06V , fast 50% über dem simulierten Wert infolge der verbleibenden Anreicherungsladung an der Grenzfläche. Demnach versagt eine reine elektrostatische Abschätzung, da der Stromfluß von Natur aus zwei-dimensional ist. Der Strom fließt zunächst senkrecht zur Halbleiterschicht, wie man am Gradient des Quasi-Fermi-Potentials in Abb. 5.8a sehen kann und dann innerhalb des Kanalbereiches mit niedrigem Widerstand nach Drain. In dem Gebiet, wo der Strom senkrecht zur Schicht fließt, ist die Ladungsträgerkonzentration extrem niedrig, was einen hohen ohmschen Widerstand ergibt. Bei der gegebenen Gatespannung ändert sich in diesem Gebiet nichts für Drainspannungen oberhalb von $V_{DS} = 0.8 \text{V}$. Dieses hochohmige Gebiet limitiert den gesamten Strom. Daher sind die Kennlinien nahezu unabhängig von der Kanallänge, solange die Kanallänge groß im Vergleich zur Schichtdicke bleibt.

Diese Funktionsweise hat zu einer guten Beschreibung der experimentellen Kennlinien geführt, ohne jegliche Annahme über Barriererniedrigung oder Tunnelstrom.

5.4 Zusammenfassung

Dünnschicht-Transistoren mit Source und Drain als top-Kontakte (Abb. 5.1) sind mit ohmschen Sourcekontakt und mit einem Verarmungs-Sourcekontakt simuliert worden, letzterer wird mit SGT bezeichnet. Im Fall des ohmschen Sourcekontaktes skaliert der Strom mit w/L . Für die kleinere Kanallänge von $L = 2 \mu\text{m}$ tritt ein Kurzkanaleffekt infolge Drain-induzierter Barriererniedrigung ein, wobei das frühe

Auftreten dieses Effektes durch die Trapverteilung verursacht wird. Das Bauelement zeigt aufgrund der Traps eine reduzierte effektive Beweglichkeit und einen Serienwiderstand des Gebietes zwischen Source und dem Kanal, gleichzeitig verbunden mit einer supra-linearen Abhängigkeit von der Gatespannung (im aktiven Bereich). Der Transistor arbeitet wie gewöhnlich mit dem Übergang in die Sättigung, wenn das Gebiet nahe Drain verarmt wird, was etwa bei $V_{DS} = V_{GS} - V_{th}$ geschieht.

Im SGT mit dem Verarmungskontakt bei Source sind die Ströme viel niedriger und man erhält einen abrupten Übergang der Ausgangskennlinien in die Sättigung bei niedriger Drainspannung. Die Verschiebung dieser Übergangsspannung mit der Gatespannung wird nur grob durch das dielektrische Modell beschrieben. Der Sättigungsstrom hängt nahezu linear von der Gatespannung ab und für niedrige Drainspannungen ist der Strom fast unabhängig von der angelegten Gatespannung, das bedeutet, in diesem Bereich kann der Strom nicht durch die Gatespannung gesteuert werden. Außerdem sind die Kennlinien nicht von der Kanallänge abhängig, von sehr kleinen Gatespannungen abgesehen. Für den SGT stimmen alle sichtbaren Eigenheiten in den Ausgangskennlinien mit den gemessenen überein.

Die detaillierte Untersuchung des ungewöhnlichen Verhaltens des SGT durch Ansehen der internen Feld- und Dichtepprofile führt auf das Folgende: Die Potential- und Elektronendichte-Profile entlang des Kanals zeigen bei einer bestimmten Drainspannung das charakteristische Verhalten am drain-seitigen Ende des Kanals, wie man es auch in konventionellen Transistoren beobachtet. Diese Spannung fällt jedoch nicht mit der Sättigung zusammen, welche schon bei niedrigerer Drainspannung auftritt. Das wird durch das Verhalten von Potential und Ladungsdichte zwischen Source und dem Kanal an der Grenzfläche zum Isolator verursacht. Dieses hochohmige Sourcegebiet limitiert den Strom des SGT. Weiterhin dehnt sich die Verarmung im Sourcegebiet nicht bis zur Grenzfläche aus, es verbleibt eine gewisse Elektronendichte für alle angelegten Drainspannungen, im Gegensatz zum vorgeschlagenen dielektrischen Modell. Zusammenfassend kann man sagen, dass der source-gated Dünnschicht-Transistor ein gewöhnlich betriebener Dünnschicht-Transistor ist, limitiert durch das Sourcegebiet mit großem Widerstand. Aufgrund der Randbedingung bei Source (Austrittsarbeit des Kontaktmaterials) wird dort eine niedrige Ladungsträgerkonzentration erzwungen, woraus ein hoher Serienwiderstand resultiert und sich daher niedrige Ströme ergeben.

Die Simulationen bestätigen, dass der SGT zu einer größeren Spannungsverstärkung bei niedrigerer Betriebsspannung führt, wie in Ref. [92] beschrieben und der geringere Strom ist ebenfalls mit geringerer Verlustleistung verbunden. Gleichzeitig wird jedoch die Steilheit vermindert, was zu einer Verringerung der Grenzfrequenz führt. Der Aufbau des SGT impliziert eine größere Source-Gate-Überlappkapazität, welche in die gleiche ungünstige Richtung wirkt. Für Aktiv-Matrix-Display Anwendungen benötigt man typischerweise $10\mu\text{A}$ pro Pixel bei 10kHz [101] und ein on-off Verhältnis von 10^7 to 10^8 [15] mit einem Sperrstrom von $\leq \text{pA}$ [102]. Der stark reduzierte Strom des SGT muß durch eine größere Weite w kompensiert werden. Diese zusätzlichen Eigenschaften relativieren die berichteten Vorteile des SGT. Weiterhin wird es wahrscheinlich von der vorgesehenen Anwendung abhängen, ob ein Erhalten der Kennlinien für reduzierte Kanallängen wirklich vorteilhaft im Vergleich zur gewöhnlichen L^{-1} -Skalierung ist.

Kapitel 6

Hysterese in organischen MOS Bauelementen

In Kennlinien von organischen Bauelementen werden immer wieder unerwünschte Hysteresen beobachtet. Hysteresen treten dabei sowohl in den Strom-Spannungskennlinien von OFETs als auch in Kapazitäts-Spannungs-(C-V-) Kennlinien von MOS-Kondensatoren auf. Diese Hysterese-Effekte sind experimentell noch nicht hinreichend charakterisiert und noch weniger von ihren Ursachen her verstanden. In der Literatur finden sich bislang nur Vermutungen, dass Trap-Umladungen oder aber bewegliche Ionen (im organischen Halbleiter oder im Isolator) dafür ursächlich seien [23, 34, 35, 89, 90]. Ausgehend von dieser Fragestellung wurden 2D-Simulationen durchgeführt und quasistatische C-V-Kennlinien von MOS-Kondensatoren berechnet. Es wird aufgezeigt, welche Hystereseformen bei C-V-Kennlinien unter Annahme der Existenz von Trapzuständen verschiedener Parameter auftreten können. Im folgenden wird also untersucht, ob Trap-Umladungen als Ursache für die beobachteten Hysteresen in Frage kommen.

6.1 Experimentelle Ergebnisse

Abb. 6.1 und Abb. 6.2 zeigen experimentelle quasistatische C-V-Kennlinien eines MOS-Kondensators auf der Basis von Arylamino-PPV [36]. Ein hochdotierter n-Siliziumwafer mit einer thermischen Oxidschicht von 40nm diente dabei als Gateelektrode. Auf dieses Substrat wurde mittels spincoating eine 54nm dicke PPV-Schicht aufgebracht, worauf anschließend noch Goldkontakte mit einem Durchmesser von 4mm für die Rückkontaktierung durch eine Schattenmaske aufgedampft wurden. Die Oxidkapazität wird bei negativer Spannung V_{GB} gemessen, das Polymer weist also eine p-Dotierung auf. In Verarmung (positive Spannung) mißt man den Wert der geometrischen Kapazität, das heißt es tritt keine Inversion auf und die Ausdehnung der Verarmungszone ist größer als die Schichtdicke, die gesamte organische Schicht ist verarmt. Abb. 6.1 zeigt den Einfluß der Temperatur. Man beobachtet mit der Temperatur eine Änderung der Hysterese. Dabei ist die Verschiebung der Kennlinien für die Sweep-Richtung von Verarmung in die Anreicherung nicht monoton mit der Temperatur, im Gegensatz zur entgegengesetzten Sweep-Richtung. Daraus läßt sich schließen, dass nicht nur ein Prozeß allein, wie etwa der Transport beweglicher Ionen,

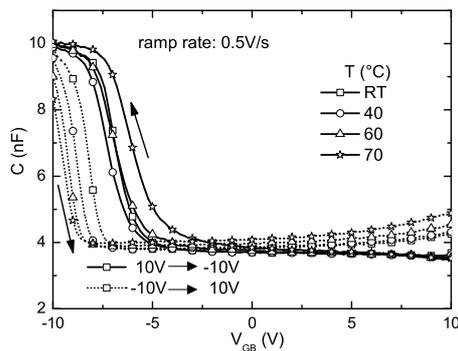


Abbildung 6.1: Quasi-statische C-V-Kurven für die beiden Sweep-Richtung bei unterschiedlichen Temperaturen.

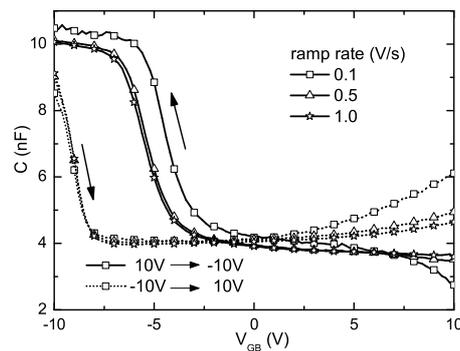


Abbildung 6.2: Quasi-statische C-V-Kurven für die beiden Sweep-Richtung bei unterschiedlichen Rampraten.

für die Hysterese verantwortlich sein kann. Abb. 6.2 zeigt den Einfluß der Ramprate auf die Hysterese. Dabei beobachtet man bei kleinerer Ramprate eine größere Hysterese. Die beobachtete Verschiebung der Kennlinien im Bereich der Anreicherung läßt sich letztlich durch eine Verschiebung der Flachbandspannung erklären. Dies kann formal durch eine zusätzliche Ladung an der Grenzfläche beschrieben werden.

Abb. 6.3 und Abb. 6.4 zeigen dynamische C-V-Kurven eines MOS-Kondensators auf der Basis von P3OT [88]. Als Gateelektrode wurde wieder ein hochdotiertes n-Siliziumsubstrat mit einer thermischen Oxidschicht von 50nm verwendet, P3OT mittels spincoating aufgebracht und anschließend Goldkontakte (Durchmesser 4mm) aufgedampft. Es sind Kennlinien für zwei verschiedene Schichtdicken (30nm und 11nm) bei variabler hold- und delay-Zeit dargestellt. Dabei ist die hold-Zeit t_H die Wartezeit vor Beginn des Durchlaufs einer Sweep-Richtung und die delay-Zeit t_D ist die Wartezeit nach jedem einzelnen Spannungssprung. Beide Zeiten sind bei den Messungen stets gleich. Die Meßfrequenz beträgt jeweils 10Hz. Die Oxidkapazität wird wieder bei negativer Spannung V_{GB} gemessen, das heißt p-Dotierung. In Verarmung (positive Spannung) ergibt sich wiederum der Wert der geometrischen Kapazität. Für die größere Schichtdicke von 30nm in Abb. 6.3 findet man eine Zunahme der Hysterese mit zunehmender hold-Zeit. Dabei verschieben die Kennlinien der Sweep-Richtung von Verarmung in die Anreicherung zu positiveren Spannungen und die der entgegengesetzten Sweep-Richtung zu negativeren Spannungen. Des weiteren ist der Anstieg der Kennlinien im Übergangsbereich für die beiden Sweep-Richtungen unterschiedlich. Die Kennlinien für die kleinere Schichtdicke von 11nm sind in Abb. 6.4 dargestellt. Aufgrund der geringeren Schichtdicke findet man eine größere geometrische Kapazität. Auch hier nimmt die Hysterese mit zunehmender hold-Zeit zu. Jedoch tritt keine signifikante Verschiebung der Kennlinien für die Sweep-Richtung von Anreicherung in die Verarmung auf, für die entgegengesetzte Richtung verschieben sie wieder mit zunehmender hold-Zeit zu positiveren Spannungen. Weiterhin verlaufen die Kennlinien im Übergangsbereich nun mit etwa dem gleichen Anstieg für beide Sweep-Richtungen, im Gegensatz zum vorherigen Fall.

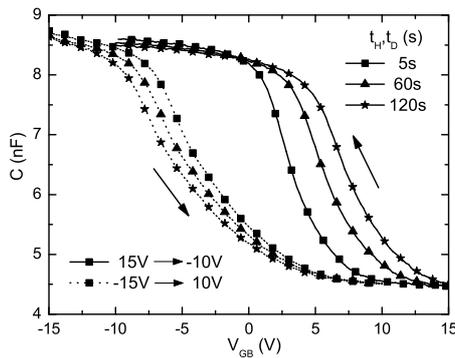


Abbildung 6.3: Dynamische C-V-Kurven (10Hz) für unterschiedliche hold-Zeiten ($t_H = t_D$) für einen Kondensator mit 30nm dicker Schicht.

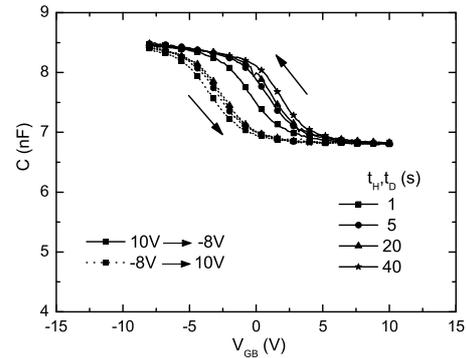


Abbildung 6.4: Dynamische C-V-Kurven (10Hz) für unterschiedliche hold-Zeiten ($t_H = t_D$) für einen Kondensator mit 11nm dicker Schicht.

In beiden Fällen beobachtet man wiederum die charakteristische Verschiebung der Flachbandspannung.

6.2 Materialparameter

Die für die Simulationen verwendete MOS-Struktur ist in Abb. 6.5 dargestellt.

Dabei beträgt die Kontaktfläche $15\mu\text{m} \times 1\mu\text{m}$. Die Isolatorschichtdicke beträgt $d_{\text{ox}} = 50\text{nm}$ und die organische Schicht ist $d_{\text{org}} = 150\text{nm}$ dick. Für das Gatekontaktmaterial wurde eine Austrittsarbeit von $\Phi_G = 4.05\text{eV}$ gewählt, das entspricht $n^+ - \text{Poly} - \text{Si}$. Dieser Wert wurde nicht variiert, da dies nur eine Verschiebung der Flachbandspannung bedeutet und entsprechend die gesamte Kennlinie auf der Spannungsachse verschoben werden würde. Die Metallaustrittsarbeit Φ_M des Bulkkontaktes hingegen wurde variiert und beträgt entweder 3eV (entspricht Lage des Leitungsbandes) oder 5eV (entspricht Lage des Valenzbandes). Für den Fall eines Neutralkontaktes entspricht die Austrittsarbeit der Lage der Fermi-Energie im Halbleiter. Die weiteren Parameter wurden wie folgt gewählt: relative Dielektrizitätskonstante des Isolators $\epsilon_{\text{ox}} = 3.9$ (entspricht SiO_2), relative Dielektrizitätskonstante des organischen Materials $\epsilon = 3.24$, Elektronenaffinität $\chi = 3.0\text{eV}$, Energielücke $E_g = 2.0\text{eV}$, Minoritätsladungsträgerlebensdauer $\tau_n = 10^{-5}\text{s}$ für Elektronen und $\tau_p = 3 \cdot 10^{-6}\text{s}$ für Löcher (Si-Werte), Beweglichkeiten $\mu_n = \mu_p = 10^{-3}\text{cm}^2/\text{Vs}$, effektive Zustandsdichten $N_C = N_V = 10^{21}\text{cm}^{-3}$ (entspricht Monomerdichte). Für den Fall einer Grunddotierung beträgt diese $N_A = 10^{17}\text{cm}^{-3}$ (die Materialien sind in der Regel schon von vornherein unbeabsichtigt

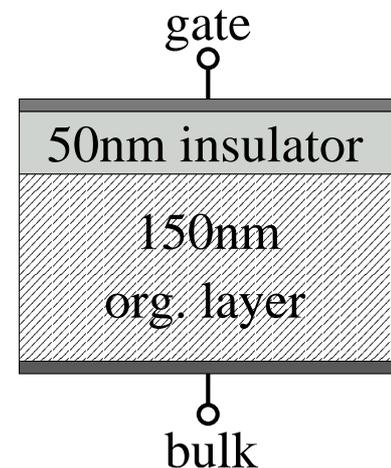


Abbildung 6.5: MOS-Struktur

dotiert, z.B. durch Oxidation) oder aber es wurde keine explizite Grunddotierung angenommen. (Für eine begrenzte Zahl von Beispielen wurde auch die Dotierung variiert, es wird jedoch im weiteren nicht darauf eingegangen.) Bezüglich der Parameter für die Trapzustände sind zunächst diskrete donator- oder akzeptorartige Trapzustände betrachtet worden. Diese können dabei in der Nähe des Valenzbandes oder in der Nähe des Leitungsbandes liegen. Es wurden auch Fälle betrachtet, wo donator- und akzeptorartige Traps gleichzeitig vorliegen, mit akzeptorartigen Traps nahe der Valenzbandkante und donatorartigen Traps nahe der Leitungsbandkante oder umgekehrt. Dabei sind jeweils die Trapkonzentrationen N_{dt} bzw. N_{at} und die energetische Lage der Traps E_D bzw. E_A in einen weiten Bereich variiert worden. Weiterhin wurde an ausgewählten Beispielen auch der Einfluß zweier diskreter Trapniveaus unterschiedlicher Lage oder aber einer Gauß- bzw. exponentiellen Verteilung von Trapzuständen untersucht. Schließlich ist auch noch der Einfluß von Grenzflächenzuständen betrachtet worden. Das Produkt von Einfangquerschnitt σ_n für Elektronen bzw. σ_p für Löcher und thermischer Geschwindigkeit v_{th} beträgt, sofern nicht anders angegeben, $\sigma_n v_{th} = \sigma_p v_{th} = 10^{-14} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$.

Unter diesen Bedingungen ergeben sich verschiedene Kennlinienverläufe. Aufgrund der Fülle an Variationsmöglichkeiten können im folgenden nur einige typische Beispiele für auftretende Kennlinienformen aufgezeigt werden, jeweils für einen ausgewählten Parametersatz und stets für beide Sweep-Richtungen. Die gewählten Kennlinien repräsentieren jedoch dabei das gesamte auftretende Spektrum an Kurvenverläufen. Sofern nicht anders angegeben, wurden die oben aufgeführten Parameterwerte verwendet.

6.3 Relevante Zeitkonstanten

Zunächst sollen verschiedene Relaxationszeiten diskutiert werden, die im Zusammenhang mit C-V-Kurven beziehungsweise mit der Trapumladung von Bedeutung sind.

In Anreicherung wird nur dann die Oxidkapazität gemessen, wenn es den Ladungsträgern im Halbleiter auch möglich ist, dem angelegten Signal schnell genug zu folgen. Dies wird durch die dielektrische Relaxationszeit

$$\tau_R = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon}{\sigma_{el}} \quad (6.1)$$

bestimmt, wobei σ_{el} die elektrische Leitfähigkeit des Bulk-Materials ist und je nach dem welche Majoritätsladungsträger vorliegen, gilt $\sigma_{el} = en\mu_n$ bzw. $\sigma_{el} = ep\mu_p$. Bei Meßfrequenzen kleiner als der reziproken dielektrischen Relaxationszeit wird in Anreicherung der Wert der Oxidkapazität gemessen. Für die quasistatischen C-V-Kennlinien in Abb. 6.1 und Abb. 6.2 als auch für die dynamischen Kennlinien bei einer Meßfrequenz von 10Hz in Abb. 6.3 und Abb. 6.4 ist diese Bedingung offensichtlich erfüllt.

In Verarmung ist die Situation etwas komplexer. Ob sich an der Oxidgrenzfläche eine Inversionsschicht ausbildet, hängt davon ab, wie schnell dort Minoritätsladungsträger durch Generation erzeugt werden können. Die Reaktionszeit (response time)

der Minoritätsladungsträger ist durch

$$\tau_{\text{inv}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{N_{\text{dop}}}{n_i} \sqrt{\tau_n \tau_p} \quad (6.2)$$

gegeben [36, 59]. Dabei bezeichnet τ_n bzw. τ_p die Minoritätsladungsträgerlebensdauer von Elektronen bzw. Löchern und N_{dop} ist die Dotierstoffkonzentration. Die Zeit für die Ausbildung der Inversion ist demnach umgekehrt proportional zur intrinsischen Ladungsträgerkonzentration n_i . Ist die Meßfrequenz kleiner als der reziproke Wert dieser Reaktionszeit, so können die Inversionsladungen problemlos dem Meßsignal folgen und man würde schließlich den Wert der Oxidkapazität messen. Für größere Meßfrequenzen ist die Generation der Inversionsladungen hingegen zu langsam, um dem Meßsignal folgen zu können. Allerdings sind sie entsprechend der angelegten Spannung V_{GB} vorhanden. Man erhält dann einen Wert für die Kapazität, welcher einer Reihenschaltung aus Oxidkapazität und Verarmungskapazität entspricht (oft als minimale Kapazität bezeichnet). Zusätzlich kann nun auch noch die Variation der angelegten Spannung V_{GB} (Spannungsrampe) so schnell erfolgen, dass die gesamte Meßzeit nicht ausreicht, um Inversionsladungen zu generieren. In diesem Fall verarmt die Halbleiterschicht immer weiter, bis diese schließlich vollständig verarmt ist. Die gemessene Kapazität entspricht dann der geometrischen Kapazität. Genau das wird im Experiment beobachtet. Sowohl bei den quasistatischen als auch bei den dynamischen C-V-Kurven mißt man in Verarmung den Wert der geometrischen Kapazität. Aufgrund der geringen intrinsischen Ladungsträgerdichte, welche aus der großen Bandlücke resultiert, ist τ_{inv} offensichtlich so groß, dass keine Inversionsschicht ausgebildet wird. Das bedeutet allerdings nicht, dass in organischen (oder anderen Materialien mit großer Bandlücke) Bauelementen überhaupt keine Inversion auftreten kann. In MOS-Transistoren können Minoritätsladungsträger von Source und Drain in das Kanalgebiet injiziert werden.

Der Kapazitätsverlauf zwischen Anreicherung und Verarmung wird letztlich durch die Verarmungslänge im Halbleiter bestimmt. Ist diese klein, sind also viele Ladungsträger (große Dotierung) vorhanden, so fällt die Kapazität allmählich ab. Gibt es nur wenig Ladungsträger, dann nimmt die Ausdehnung der Verarmungszone schnell mit der Spannung zu und die Kapazität fällt in einem engen Spannungsbereich nahe der Flachbandspannung ab. Existieren allerdings Traps im Material, so kann der Verlauf auch durch die Umladung der Trapzustände beeinflusst werden.

Die Besetzung von Traps ergibt sich aus der Lösung der Trapratengleichung. Mit ihrer Hilfe kann man auch versuchen, die Relaxationszeit für die Trapumladung abzuschätzen. Liegt die Energie des Trapniveaus E_t ($E_t = E_D$ für donatorartige Trapzustände und $E_t = E_A$ für akzeptorartige) einige kT unterhalb (oberhalb) des intrinsischen Energieniveaus E_i , so kann man die Emission und den Einfang von Elektronen (Löchern) vernachlässigen. Nimmt man weiter an, dass entweder der Einfang oder die Emission von Ladungsträgern dominiert, lassen sich Relaxationszeiten abschätzen. Aus der Rate für den Einfang von Löchern $c_p = \sigma_p v_{\text{th}} p$ ergibt sich mit $p = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{kT}\right)$ die Umladerelaxationszeit für Locherfang τ_{c_p} zu

$$\tau_{c_p} = [\sigma_p v_{\text{th}} p]^{-1} = \left[\sigma_p v_{\text{th}} N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{kT}\right) \right]^{-1}. \quad (6.3)$$

Sie ist also abhängig von der Lochkonzentration p bzw. vom Abstand des Fermi-niveaus von der Valenzbandkante $E_V - E_F$. Aufgrund dessen variiert diese Größe innerhalb des Bauelementes entsprechend der Ladungsträgerkonzentration. Die Umladerelaxationszeit für Lochemission τ_{e_p} ergibt sich entsprechend aus der Lochemissionsrate $e_p = \sigma_p v_{th} p_1$ mit $p_1 = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_t}{kT}\right)$ zu

$$\tau_{e_p} = [\sigma_p v_{th} p_1]^{-1} = \left[\sigma_p v_{th} N_V \exp\left(\frac{E_V - E_t}{kT}\right) \right]^{-1}. \quad (6.4)$$

Diese Größe ist nun im Gegensatz zur vorherigen nicht von der Lage des Fermi-niveaus abhängig, sondern nur von der Lage des Trapniveaus E_t . Sie ist also konstant. Entsprechend ergibt sich die Umladerelaxationszeit für Elektroneneinfang τ_{c_n} aus $c_n = \sigma_n v_{th} n$ und $n = N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{kT}\right)$ zu

$$\tau_{c_n} = [\sigma_n v_{th} n]^{-1} = \left[\sigma_n v_{th} N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{kT}\right) \right]^{-1}. \quad (6.5)$$

und die Umladerelaxationszeit für Elektronenemission τ_{e_n} aus $e_n = \sigma_n v_{th} n_1$ und $n_1 = N_C \exp\left(\frac{E_t - E_C}{kT}\right)$ zu

$$\tau_{e_n} = [\sigma_n v_{th} n_1]^{-1} = \left[\sigma_n v_{th} N_C \exp\left(\frac{E_t - E_C}{kT}\right) \right]^{-1}. \quad (6.6)$$

Aufgrund der Abhängigkeit von der Ladungsträgerkonzentration kann man also keine generelle Zeitkonstante für den Einfang von Ladungsträgern angeben. Des weiteren wird die tatsächliche Zeitabhängigkeit durch die Trapratengleichung beschrieben und ist somit von der Trapbesetzung sowie von der Einfangrate als auch der Emissionsrate abhängig. Trotzdem erkennt man anhand der einfachen Ausdrücke, dass Trapumladung zu Hysteresen in C-V-Kurven führen kann. Geladene Trapzustände nahe der Isolatorgrenzfläche bewirken eine Verschiebung der Flachbandspannung und damit entsprechend auch eine Verschiebung der C-V-Kennlinie (analog zum Einfluß einer Grenzflächenladung). Sind die Zeitkonstanten für das Laden und Entladen der Niveaus jedoch verschieden, so können sich unterschiedliche C-V-Kurven für die beiden Sweep-Richtungen der Spannung ergeben.

6.4 Hysterese bedingt durch Ausbildung der Inversionsschicht

Zunächst soll eine Hystereseform betrachtet werden, welche auf die nur allmähliche Ausbildung der Inversionsschicht zurückzuführen ist und somit also ohne Einbeziehung jeglicher Trapzustände entsteht. Wie schnell sich die Inversionsschicht ausbilden kann, wird durch die Reaktionszeit (response time) der Minoritätsladungsträger bestimmt, welche durch Gleichung (6.2) gegeben ist. Diese Zeit ist demnach insbesondere von der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration n_i abhängig, deren Wert sehr stark mit der Bandlücke E_g des Materials variiert. In der Simulation kann nun durch Variation der Bandlücke E_g der Einfluß dieser Zeitkonstanten auf die C-V-Kennlinien aufgezeigt werden. Die entsprechenden Kennlinien sind in Abb. 6.6

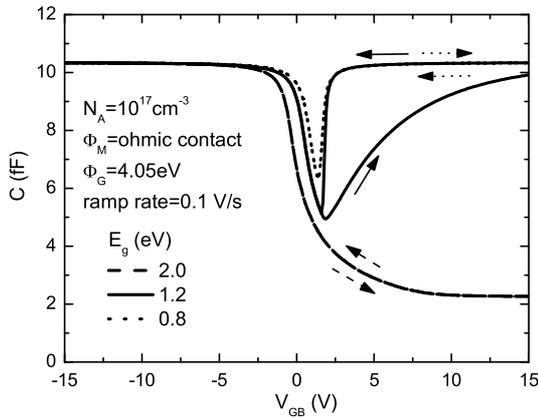


Abbildung 6.6: Simulierte C-V-Kennlinien für verschiedene Werte der Bandlücke. Die Austrittsarbeit des Bulk-Kontaktmaterials wurde dabei so gewählt, dass diese stets auf Höhe des Valenzbandniveaus liegt (ohmscher Kontakt, Anreicherungskontakt). Dotierung $N_A = 10^{17} \text{cm}^{-3}$, Kontaktfläche $15 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$.

dargestellt. Um am Bulk-Kontakt vergleichbare Verhältnisse einzustellen, wurde der Wert für die Metallaustrittsarbeit jeweils so gewählt, dass diese auf Höhe des Valenzbandes liegt. Die Austrittsarbeit des Gatekontaktmaterials wurde hingegen konstant gehalten. Wegen der unterschiedlichen Größe der Bandlücke ergibt sich daraus allerdings eine jeweils unterschiedliche Flachbandspannung. Das ist auch in Abb. 6.6 erkennbar, mit größerer Bandlücke verschiebt sich die Flachbandspannung (der Übergang von Anreicherung in die Verarmung) zu etwas negativeren Werten. Für eine große Bandlücke von 2eV beobachtet man nun einen Übergang der C-V-Kennlinien von der Oxidkapazität bei negativen Spannungen (Anreicherung) auf den Wert der geometrischen Kapazität bei positiven Spannungen, welcher der vollständig verarmten Schicht entspricht. In diesem Fall ist die Bandlücke zu groß und damit die Ladungsträgergeneration viel zu langsam für die Ausbildung einer Inversion. Oder anders ausgedrückt, ist wegen der geringen intrinsischen Ladungsträgerkonzentration die Zeit τ_{inv} zu groß und es können sich keine Inversionsladungen innerhalb der vergleichsweise kurzen Meßzeit aufbauen. Da nun das Feld nicht durch eine Inversionsschicht vom Halbleiter abgeschirmt wird, nimmt die Weite der Verarmung im Halbleiter immer mehr zu, bis schließlich die gesamte Schicht verarmt ist. Im Fall einer geringen Bandlücke von 0.8eV ist die Zeit für die Ausbildung der Inversionsschicht klein genug, das heißt klein gegenüber der Meßzeit, und man erhält eine gewöhnliche (quasistatische) MOS-Kennlinie. Speziell in diesem Fall erhält man diese auch ohne SRH-Rekombination. Offenbar ist hier die Ladungsträgerkonzentration im Material aufgrund der geringen Bandlücke groß genug, dass ein Zufluß von Minoritätsladungsträgern aus dem Bulk-Material zur Grenzfläche möglich ist. Doch schon bei etwas größeren Bandlücken ist die Ladungsträgerkonzentration dafür zu niedrig, so dass Inversionsladungen nur mittels Generation erzeugt werden können. Im Fall der mittleren Bandlücke von 1.2eV kann innerhalb der Meßzeit die Inversion nur langsam aufgebaut werden und so steigt für positive Spannungen die Kennlinie langsam auf den Wert der Oxidkapazität an. Der Abbau der Inversion erfolgt hingegen vergleichsweise schnell und so beobachtet man einen gewöhnlichen Kennlinienverlauf für die Sweep-Richtung von positiven zu negativen Spannungen. Die Ursache liegt in einer wesentlich größeren Rekombinationsrate beim Abbau der Inversion als Generationsrate zum Aufbau der Inversion.

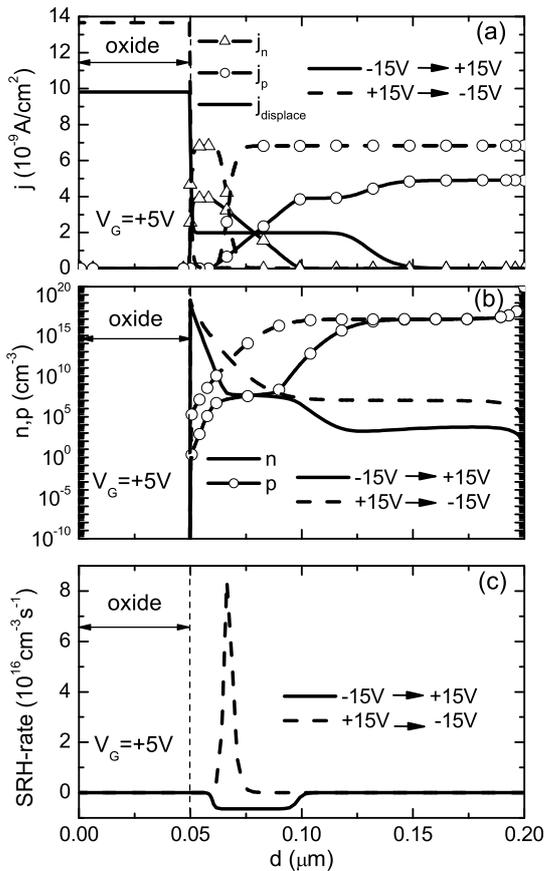


Abbildung 6.7: Verhalten von Stromdichten (a), Ladungsträgerdichten (b) und Rekombinations-/Generationsrate (c) entlang einer Schnittlinie in der Mitte des MOS-Kondensators vom Gatekontakt zum Bulkkontakt für die C-V-Kennlinie mit $E_g = 1.2\text{eV}$ aus Abb. 6.6 bei $V_{GB} = +5\text{V}$.

Das soll in Abb. 6.7 verdeutlicht werden. Gezeigt sind die inneren Verhältnisse entlang der mittleren Schnittlinie des MOS-Kondensators. Bei $d = 0\mu\text{m}$ ist der Gatekontakt, bei $d = 0.05\mu\text{m}$ die Grenzfläche und bei $d = 0.2\mu\text{m}$ der Bulkkontakt. Dargestellt sind die Verhältnisse jeweils für eine anliegende Gatespannung von $V_{GB} = +5\text{V}$, also im Bereich der Hysterese. In Abb. 6.7a sind die Stromdichten für Elektronen-, Loch- und Verschiebungsstrom dargestellt. Deren Verläufe sind für die beiden Sweep-Richtungen unterschiedlich. Im Oxid liegt natürlich nur eine Verschiebungsstromdichte vor. Da der Abbau der Inversion schneller erfolgt (und dementsprechend schnellere Änderung der elektrischen Feldstärke im Oxid), muß diese für einen Spannungs-Sweep von positiven zu negativen Spannungen entsprechend größer sein. Im Halbleiter fällt der Verschiebungsstrom jedoch schnell auf Null ab. Im Gegensatz zum entgegengesetzten Spannungs-Sweep, dort wird zunächst ein Wert von etwa $2 \cdot 10^{-9}\text{A/cm}^2$ angenommen und der Verschiebungsstrom fällt erst in der Mitte der Halbleiterschicht auf Null ab. Da die Inversion nur langsam aufgebaut wird, dehnt sich die Verarmungszone zunächst weit in den Halbleiter hinein aus und verringert sich dann wieder mit zunehmender Ausbildung der Inversion. Schließlich nimmt die Ausdehnung der Verarmung einen Wert entsprechend dem Oberflächenpotential bei Inversion an. (Oft als maximale Ausdehnung der Verarmungsschicht bezeichnet, allerdings ist die Ausdehnung größer, wenn keine Inversion vorhanden ist.) Erstreckt sich die Verarmungszone über die gesamte Halbleiterschicht (vollständig verarmt),

so fällt die Verschiebungsstromdichte erst nahe am Bulkkontakt ab. Der Elektronenstrom ist nur in einem Bereich der Grenzfläche bedeutend, wo Elektronen durch Generation erzeugt werden oder wo sie rekombinieren (vergleiche mit Abb. 6.7c). Direkt an der Grenzfläche fällt dieser wieder auf Null ab. Entsprechend dem Anstieg des Elektronenstroms fällt der Lochstrom zur Grenzfläche hin ab. Die Summe aus beiden ergibt den Leitungsstrom. Im Bulk-Material ist dieser praktisch durch den Lochstrom gegeben und ist am Bulkkontakt für die beiden Sweep-Richtungen unterschiedlich groß. Aus diesen beiden Werten der Lochstromdichte bzw. aus der Differenz der Gesamtstromdichten ($j_{tot} = j_n + j_p + j_{displace}$) am Gate- und am Bulkkontakt erhält man unmittelbar die entsprechenden Ströme bzw. Kapazitäten der C-V-Kennlinie bei $V_{GB} = +5V$. Abb. 6.7b zeigt den Verlauf der Elektronen- bzw. Lochdichten. Diese unterscheiden sich erheblich (man beachte die logarithmische Darstellung) für die beiden Sweep-Richtungen. Für den Spannungs-Sweep von negativen zu positiven Spannungen wird die Schicht zunächst teilweise verarmt, da die Inversion nur langsam aufgebaut wird. Dadurch ergeben sich hier viel niedrigere Ladungsträgerkonzentrationen (entsprechend stärker sind die Bänder verbogen) als für die umgekehrte Richtung. Die Rekombinations- bzw. Generationsraten sind proportional zur Abweichung der Ladungsträgerdichten vom Gleichgewicht, also proportional zum Faktor $np - n_i^2$. Berechnet man den Betrag dieser Größe für die beiden Sweep-Richtungen jeweils an der Stelle, wo die beiden Ladungsträgerkonzentrationen gleich groß sind, so unterscheiden sich die Werte etwa um einen Faktor 150. Somit muß sich also auch die Generationsrate zur Erzeugung der Inversionsladungen von der Rekombinationsrate bei deren Abbau unterscheiden. Dies ist explizit in Abb. 6.7c dargestellt. Die Generation von Ladungsträgern erfolgt zwar in einem etwas größeren Bereich der Halbleiterschicht, die Rate ist jedoch entscheidend niedriger als die Rekombinationsrate. Darin liegt letztlich die Ursache der auftretenden Hysterese. Am größten ist die Rekombination in dem Bereich, wo Elektronen- und Lochdichte bzw. Elektronen- und Lochstrom gleich groß sind.

6.5 Hysterese bedingt durch Bulktraps

Im folgenden werden nun verschiedene Parametersätze für Trapzustände betrachtet und dadurch auftretende Hysteresen vorgestellt.

Zunächst sollen diskrete Bulktraps berücksichtigt werden. Dabei treten zum einen Fälle ohne Hysterese auf. In Abb. 6.8 wurden akzeptorartige Zustände in der Nähe der Valenzbandkante angenommen mit einer Konzentration von 10^{17}cm^{-3} , die Austrittsarbeit des Bulk-Kontaktmaterials beträgt 5eV und es wurde keine explizite Grunddotierung angenommen. Wegen der akzeptorartigen Traps liegt die Fermi-Energie in diesem Fall zwischen Valenzbandkante und Trapniveau. Je größer der Abstand des Trapniveaus zum Valenzband, desto weiter liegt die Fermi-Energie vom Valenzband entfernt und um so geringer ist damit auch die Ladungsträgerkonzentration. Sind die Trapzustände nun relativ weit entfernt von der Bandkante, resultiert daraus eine große Verarmungslänge (aufgrund der geringen Ladungsträgerkonzentration). Dies führt dazu, dass die C-V-Kennlinie in einem sehr kleinen Spannungsbereich von der Oxidkapazität zur geometrischen Kapazität übergeht bzw. umgekehrt für den entgegengesetzten Spannungs-Sweep. Ein solch scharfer Über-

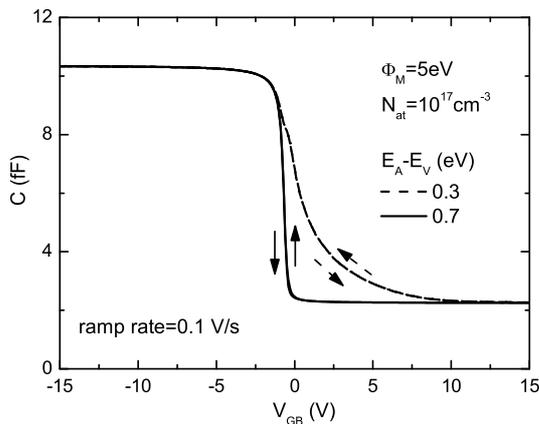


Abbildung 6.8: Simulierte C-V-Kennlinien unter Annahme akzeptorartiger Traps im Bereich des Valenzbandes, ohne explizite Grunddotierung.

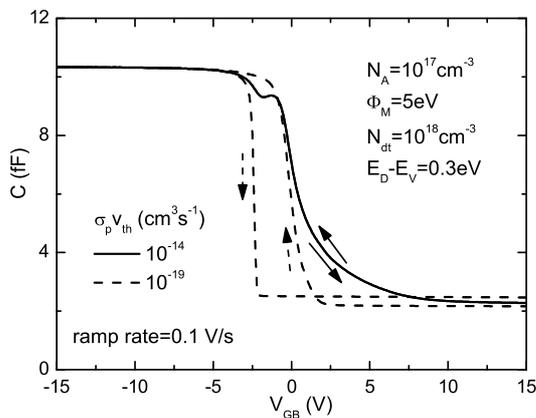


Abbildung 6.9: Simulierte C-V-Kennlinie unter Annahme einer Akzeptordotierung und donatorartiger Traps nahe des Valenzbandes für zwei verschiedene Werte von $\sigma_p v_{th}$.

gang tritt auch im Fall ohne Traps und ohne einer Dotierung auf. Befinden sich die Akzeptortraps energetisch relativ nahe an der Bandkante, liegt eine höhere Ladungsträgerkonzentration vor und damit eine kleinere Verarmungslänge. Das resultiert in einer größeren Verarmungskapazität und der Übergang zwischen Oxid- und geometrischer Kapazität erfolgt allmählicher. Dieser Fall ist vergleichbar mit einer entsprechenden Akzeptorgrunddotierung (flache Störstellen). Es tritt jedoch auch eine kleine Struktur bei etwa 0V in der Kennlinie auf. Weiterhin zeigt sich, dass der Übergangsbereich vom Produkt $\sigma_p v_{th}$ abhängig ist, wobei für kleinere Werte der Übergang schärfer wird, bleibt jedoch allmählicher als im Fall der Niveaus mit dem größeren Abstand zur Bandkante (Kennlinie nicht dargestellt). Trapumladung liefert also ebenfalls einen Beitrag zum allmählichen Übergang der Kennlinie. Andernfalls würde man keine Abhängigkeit von $\sigma_p v_{th}$ erwarten (man vergleiche Gln. (6.3), (6.4)).

In Abb. 6.9 wurden hingegen donatorartige Zustände mit einem energetischen Abstand von 0.3eV zur Valenzbandkante und einer Konzentration von 10^{18}cm^{-3} angenommen. Zusätzlich liegt eine Akzeptordotierung von 10^{17}cm^{-3} vor. Im Fall des größeren Wertes für $\sigma_p v_{th}$ führt die Umladung der Trapzustände zu einer C-V-Kennlinie mit einer deutlich ausgeprägten Struktur ohne Hysterese. Vergrößert man die Trapumladezeit durch Verkleinerung von $\sigma_p v_{th}$, ergibt sich eine Hysterese.

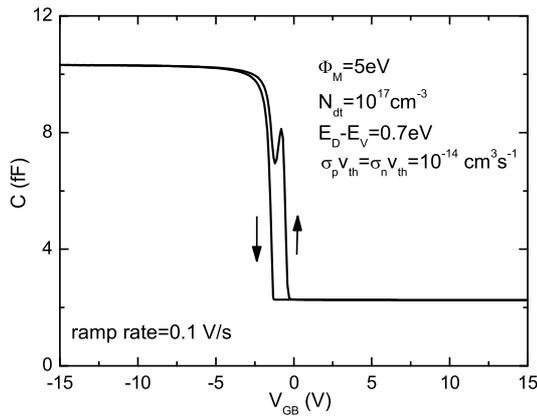


Abbildung 6.10: Simulierte C-V-Kennlinie unter Annahme donatorartiger Traps mit einem energetischen Abstand von 0.7eV zum Valenzband, ohne explizite Grunddotierung.

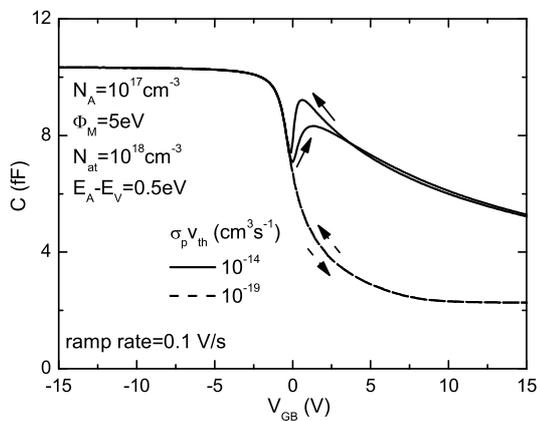


Abbildung 6.11: Simulierte C-V-Kennlinien unter Annahme einer Akzeptordotierung und zusätzlich akzeptorartiger Traps mit einem energetischen Abstand von 0.5eV zum Valenzband für zwei verschiedene Werte von $\sigma_p v_{th}$.

Insbesondere für die Kennlinie von Anreicherung in die Verarmung tritt jedoch ein sehr scharfer Übergang im Bereich der Flachbandspannung auf, welcher so nicht im Experiment beobachtet wird.

In Abb. 6.10 sind ausschließlich donatorartige Traps mit einem energetischen Abstand von 0.7eV von der Valenzbandkante und einer Konzentration von 10^{17}cm^{-3} angenommen, ohne explizite Grunddotierung. Bei diesen Parametern beobachtet man eine Hysterese. Dabei tritt allerdings wieder ein sehr scharfer Übergang der Kennlinien beider Sweep-Richtungen auf. Die Kennlinie von Verarmung in die Anreicherung weist zudem einen ausgeprägten Peak auf.

Abb. 6.11 zeigt C-V-Kennlinien, bei denen neben einer Akzeptordotierung von 10^{17}cm^{-3} weitere akzeptorartige Zustände mit einer Konzentration von 10^{18}cm^{-3} und einem energetischen Abstand von 0.5eV von der Valenzbandkante berücksichtigt wurden. Für den größeren Wert von $\sigma_p v_{th}$ wird bei positiven Spannungen nicht der Wert der geometrischen Kapazität erreicht (bzw. er stellt sich erst später ein). Grund dafür ist, dass hier die Trapumladung stark zur Kapazität beiträgt. Dass dieser Beitrag auch bei großen positiven Spannungen noch bedeutend ist, weist darauf hin, dass hier die Trapzustände auch in einem großen räumlichen Bereich des Halbleiters umgeladen werden können. Die Kennlinien beider Sweep-Richtungen weisen

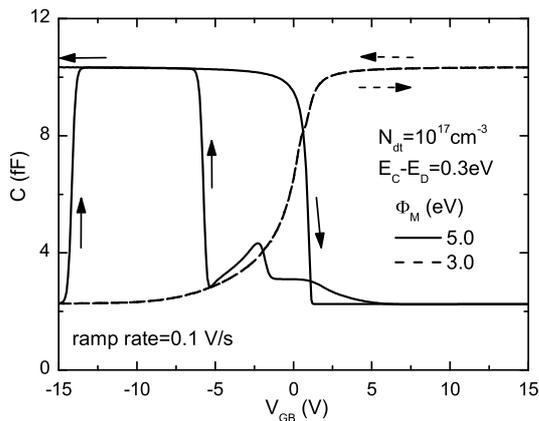


Abbildung 6.12: Simulierte C-V-Kennlinien unter Annahme donatorartiger Traps nahe des Leitungsbandes und ohne explizite Grunddotierung bei unterschiedlicher Bulk-Kontaktaustrittsarbeit.

einen Peak auf, welcher jedoch jeweils unterschiedlich stark ausgeprägt ist. Um den starken Einfluß der Trapumladung zu verdeutlichen, ist noch eine Kennlinie für einen kleineren Wert von $\sigma_p v_{th}$ dargestellt. Aufgrund der größeren Trapumladezeit verringert sich auch der Beitrag zur Kapazität. Die Kennlinie weist nun keine Hysterese mehr auf und nimmt in Verarmung den Wert der geometrischen Kapazität an. Eine weitere Verringerung von $\sigma_p v_{th}$ hat dabei keinen weiteren Einfluß auf den Kennlinienverlauf. Der verbleibende allmähliche Übergang der Kennlinie resultiert also allein aus der vorhandenen hohen Konzentration beweglicher Ladungsträger.

Abb. 6.12 zeigt eine Hystereseform, welche im Vergleich zu den experimentell beobachteten Kennlinien in entgegengesetzter Richtung durchlaufen wird. Außerdem tritt auch noch ein ungewöhnliches Verhalten in Anreicherung auf. Hier wurden donatorartige Zustände mit einer Konzentration von 10^{17}cm^{-3} und einem energetischen Abstand von 0.3eV zur Leitungsbandkante berücksichtigt. Es liegt keine explizite Grunddotierung vor. Dass dieses Verhalten klar durch den Einfluß des Bulkkontaktes verursacht wird, zeigt sich, wenn man bei ansonsten gleichen Parametern die Austrittsarbeit von 5eV auf 3eV ändert. Dann ergibt sich eine Kennlinie ohne Hysterese. Da die Donatoren relativ nahe am Leitungsband liegen, verhalten sich diese ähnlich einer Donatordotierung (dementsprechend Anreicherung bei positiver Spannung). Bei einer Austrittsarbeit von 5eV liegt jedoch für Elektronen ein Schottky-Kontakt vor, dieser verursacht das eigenartige Verhalten der C-V-Kennlinie. Diesen Fall wird man im Experiment stets vermeiden (anderes Kontaktmaterial wählen). Er ist daher nicht von praktischer Bedeutung und der genaue Mechanismus wurde nicht im Detail untersucht.

Abb. 6.13 zeigt wieder eine Hystereseform, die durch Umladung von Traps hervorgerufen wird. Hierbei wurden zusätzlich zu einer Akzeptordotierung von 10^{17}cm^{-3} donatorartige Trapzustände mit einer Konzentration von 10^{18}cm^{-3} und einem energetischen Abstand zur Valenzbandkante von 0.5eV angenommen. Die Austrittsarbeit des Bulk-Kontaktmaterials beträgt 5eV . Dargestellt sind C-V-Kennlinien für verschiedene Rampraten, wobei sich die Hysterese mit der Ramprate ändert. Die Kennlinie von Verarmung in die Anreicherung ist nahezu unabhängig von der Ramprate und weist einen ausgeprägten Peak auf. Für die entgegengesetzte Sweep-Richtung zeigt sich jedoch eine deutliche Abhängigkeit von der Ramprate, wobei die Hystere-

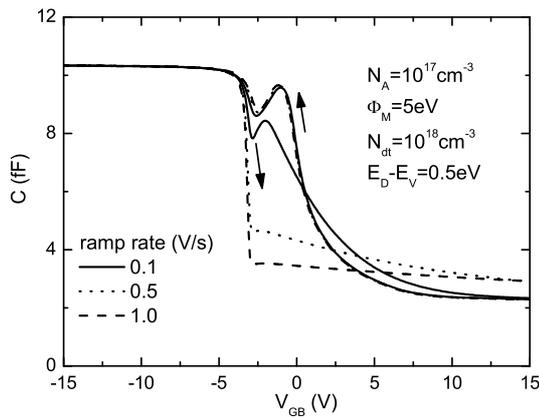


Abbildung 6.13: Simulierte C-V-Kennlinien unter Annahme einer Akzeptordotierung und donatorartiger Traps mit einem energetischen Abstand von 0.5 eV zum Valenzband für verschiedene Rampraten.

se mit größerer Rate zunimmt. Entscheidend für die Hysterese sind unterschiedliche Trapumladezeiten, woraus sich je nach Sweep-Richtung ein unterschiedliches Verhalten der getrapten Ladungsträger (positive Donatoren) ergibt. Abb. 6.14 zeigt deren Verlauf entlang der Mitte des MOS-Kondensators vom Gate- zum Bulkkontakt in Abhängigkeit von der Spannung am Gatekontakt, jeweils für einen Spannungssweep von Verarmung in die Anreicherung (a) und umgekehrt von Anreicherung ausgehend in die Verarmung (b). Dabei zeigt sich ein deutlicher Unterschied. Der Abstand des Fermi-Niveaus zum Valenzband beträgt $E_F - E_V = 0.556 \text{ eV}$, liegt somit knapp oberhalb des Trapniveaus. Beginnt man also in Verarmung (Abb. 6.14a), so sind die Donatoren neutral (besetzt). Nur am Bulkkontakt sind sie aufgrund der Randbedingung unbesetzt und damit positiv geladen. Mit zunehmend negativer Spannung müssen die Donatoren nun positiv (unbesetzt) geladen werden. An der Oxidgrenzfläche geschieht das bei Spannungen zwischen 0V (durchgezogene Linie) und -2 V (gepunktete Linie) verhältnismäßig schnell. In der entgegengesetzten Sweep-Richtung hingegen (Abb. 6.14b) erfolgt der Abbau der an der Grenzfläche angereicherten Trapladungen verhältnismäßig langsam (durchgezogene Linie entspricht wieder 0V). Beginnend in Verarmung (Abb. 6.14a) ist Relaxationszeit τ_{c_p} wegen des großen Abstandes von Valenzbandkante und Fermi-Niveau (Gleichung (6.3)) zunächst noch groß, doch auch die Verhältnisse im Halbleiter ändern sich zunächst langsam, da bei großen Spannungen ein Großteil der Gatespannung über dem Oxid abfällt. Somit erfolgt die Umladung trotzdem noch ausreichend schnell. Mit beginnender Anreicherung nimmt τ_{c_p} jedoch sehr schnell ab, die Donatoren können (im Bereich der Oxidgrenzfläche) nun sehr schnell umgeladen werden. Sind alle Donatoren umgeladen, fällt die Kapazität zunächst etwas ab, bis die Anreicherung der beweglichen Löcher an der Grenzfläche entsprechend groß genug ist und die Kapazität weiter ansteigt. Es tritt ein Peak in der Kennlinie auf. Dieser ist demnach als ein Übergang zwischen zwei Kennlinien zu verstehen, die sich in ihrer Flachbandspannung unterscheiden, verursacht durch Umladung der Donatoren an der Grenzfläche. Beginnt man in Anreicherung, ist zunächst der Abbau der beweglichen Ladungsträgerdichte p entscheidend, bis dann auch die positiven Traps umgeladen werden müssen. Das kann nun jedoch aufgrund der großen Relaxationszeit τ_{e_p} (großer Abstand des Trapniveaus von der Bandkante, Gleichung (6.4)) nicht so schnell erfolgen, wie es

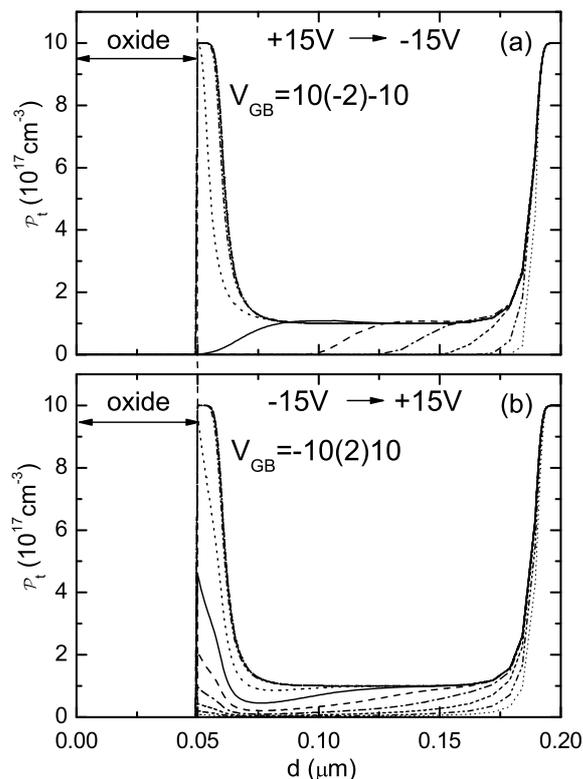


Abbildung 6.14: Konzentration getrappter Ladungen entlang der Mitte des MOS-Kondensators vom Gatekontakt ($d = 0 \mu\text{m}$) zum Bulkkontakt ($d = 0,2 \mu\text{m}$) bei Variation der Spannung V_{GB} . (a) Spannungs-Sweep von Verarmung ausgehend in die Anreicherung, (b) Spannungs-Sweep von Anreicherung in die Verarmung, Parameter entsprechend Kennlinie aus Abb. 6.13 mit einer Ramprate von $0,1 \text{ V/s}$.

die schnelle Änderung der Verhältnisse im Halbleiter in der Nähe des Flachbandfalles erfordern würde. An der Grenzfläche bleibt eine relativ hohe Konzentration an Trapladungen zurück, die nur verhältnismäßig langsam abgebaut werden kann, was sich insbesondere bei den größeren Rampraten auswirkt. Aufgrund der Traps ist die Konzentration der beweglichen Ladungsträger p im Bulk-Material stark reduziert, sie beträgt etwa $6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ statt 10^{17} cm^{-3} ohne Traps. Die beweglichen Ladungsträger können daher nur in Anreicherung zur Kapazität beitragen. In Abb. 6.15 sind Kennlinien bei einer Ramprate von 1 V/s für verschiedene Werte von $\sigma_p v_{th}$ verglichen. Die Kennlinie mit dem größten Wert entspricht dabei jener aus Abb. 6.13. Mit kleineren Werten vergrößert sich die Zeitkonstante, sowohl für Locheinfang als auch für Lochemission. Von Verarmung ausgehend, können dadurch die positiv geladenen Donatoren an der Grenzfläche nicht schnell genug entstehen und der Peak in der Kennlinie verschwindet, wie auch der allmähliche Anstieg der Kapazität. Die Verschiebung der Flachbandspannung durch zunehmend positiv geladene Donatoren an der Grenzfläche erfolgt bei kleinen Werten von $\sigma_p v_{th}$ zu langsam, somit zeigt die Kennlinie keinen Peak mehr. Auch in entgegengesetzter Sweep-Richtung erfolgt die Umladung langsamer und so wird schneller der Wert der geometrischen Kapazität angenommen. Bei diesen Kennlinien tritt ebenfalls wieder der scharfe Übergang zwischen Oxid- und geometrischer Kapazität auf, was nicht der experimentellen Beobachtung entspricht. Abb. 6.16 zeigt den Einfluß der Austrittsarbeit am Bulkkontakt für eine Ramprate von $0,1 \text{ V/s}$. Die Kennlinie mit dem größten Wert entspricht dabei wieder der Kennlinie aus Abb. 6.13. Dabei macht es keinen Unterschied, ob ein

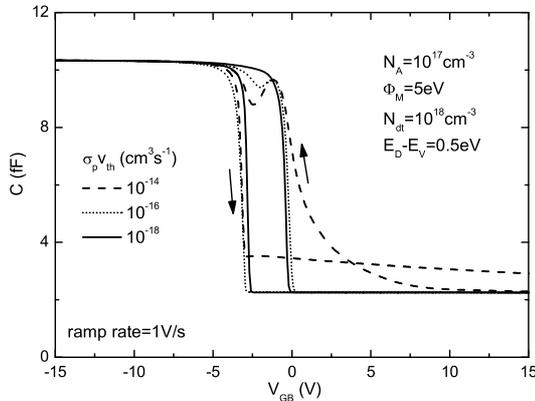


Abbildung 6.15: Simulierte C-V-Kennlinien für verschiedene Werte von $\sigma_p v_{th}$ bei einer Ramprate von 1V/s, sonstige Parameter wie in Abb. 6.13.

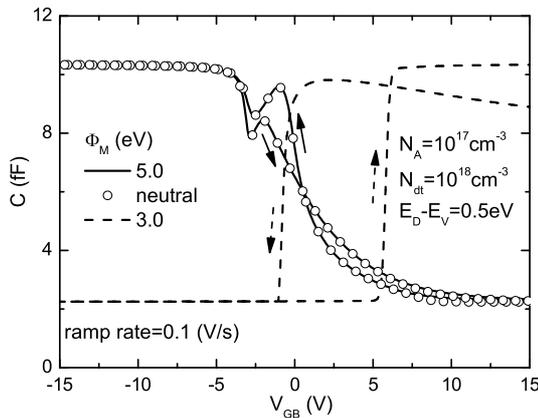


Abbildung 6.16: Simulierte C-V-Kennlinien bei Variation der Austrittsarbeit des Bulk-Kontaktmaterials und einer Ramprate von 0.1V/s, sonstige Parameter wie in Abb. 6.13.

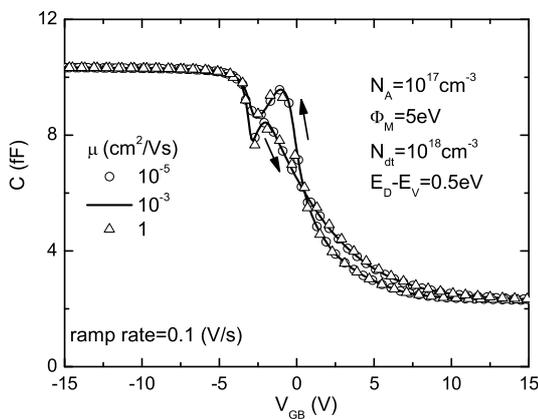


Abbildung 6.17: Simulierte C-V-Kennlinien bei unterschiedlichen Ladungsträgerbeweglichkeiten und einer Ramprate von 0.1V/s, sonstige Parameter wie in Abb. 6.13.

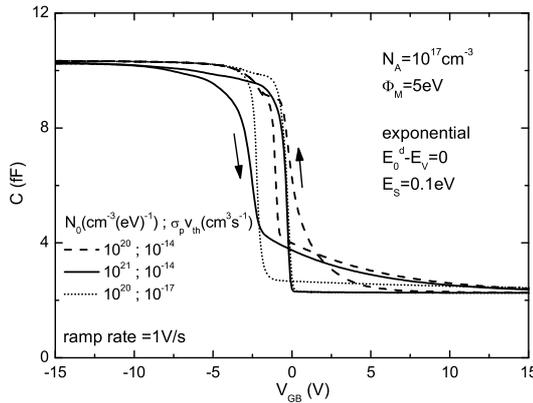


Abbildung 6.19: Simulierte C-V-Kennlinien unter Annahme einer Exponentialverteilung donatorartiger Traps für zwei verschiedene Werte der Maximalkonzentration und $\sigma_p v_{th}$.

anfangs steiler Abfall gefolgt von einem allmählichen Abklingen auf den Wert der geometrischen Kapazität. Letzteres tritt wieder nur für genügend große $\sigma_p v_{th}$ auf.

6.6 Hysterese bedingt durch Grenzflächentraps

Bisher wurden Bulktraps betrachtet. Im folgenden soll nun noch auf den Einfluß von Trapzuständen, welche ausschließlich an der Grenzfläche zum Oxid lokalisiert sind, eingegangen werden. In Abb. 6.20 wurden akzeptorartige Grenzflächenzustände mit einer Konzentration von 10^{12} cm^{-2} angenommen, sowie eine Akzeptordotierung von 10^{17} cm^{-3} und eine Austrittsarbeit des Bulk-Kontaktmaterials von 5eV. Bei einem energetischen Abstand des Trapniveaus zur Valenzbandkante von 0.5eV tritt ein ausgeprägter Peak in der Kennlinie auf, welcher für beide Sweep-Richtungen gleichermaßen durchlaufen wird. Bei 0.9eV Abstand ist die Peak-Breite geringer und wird nur für die Sweep-Richtung von Verarmung in die Anreicherung durchlaufen, d.h. es tritt eine Hysterese auf. In Abb. 6.21 sind entsprechende Kennlinien unter Berücksichtigung donatorartiger Zustände dargestellt, bei ansonsten übereinstimmenden Parametern. Dabei tritt qualitativ das gleiche Kennlinienverhalten auf, allerdings sind die Kennlinien gegeneinander verschoben. Zum Vergleich ist in Abb. 6.20 und Abb. 6.21 jeweils die Kennlinie im Fall ohne Traps eingezeichnet. Diese Verschiebung ist, auf die unterschiedliche Ladung von Donatoren und Akzeptoren zurückzuführen. Beginnend in Anreicherung, sind die Trapniveaus unbesetzt. Das heißt, die Akzeptoren sind neutral und die Kennlinie folgt zunächst dem Kennlinienverlauf im Fall ohne Traps. Unbesetzte Donatoren sind hingegen positiv geladen, was entsprechend eine Verschiebung der Kennlinie zu negativeren Spannungen bedeutet. Beginnend in Verarmung, sind die Trapniveaus besetzt. Die Akzeptoren sind also negativ geladen, wodurch die Kennlinie zu positiveren Spannungen verschoben wird. Nach der Umladung folgt die Kennlinie wieder dem Verlauf im Fall ohne Traps. Die Donatoren hingegen sind im besetzten Zustand neutral und so folgt der Anstieg der Kapazität zunächst etwa dem Verlauf wie im Fall ohne Traps. Mit der Umladung der Donatoren wird die Kennlinie allerdings wieder zu negativeren Spannungen verschoben. Im Fall von Bulktraps trat beim Wechsel von akzeptor- zu donatorartigen Zuständen ein deutlich größerer Unterschied auf, wenn

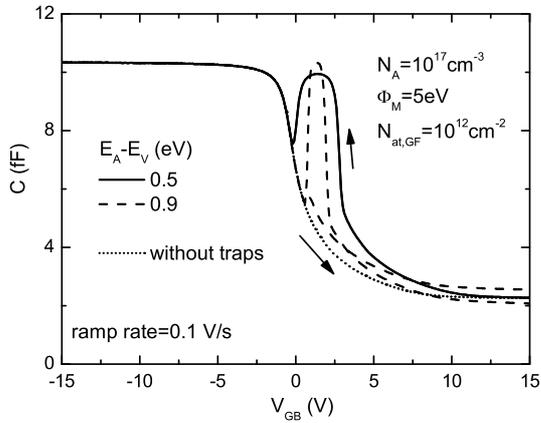


Abbildung 6.20: Simulierte C-V-Kennlinien unter Annahme einer Akzeptordotierung und zusätzlich akzeptorartiger Grenzflächentraps mit einem energetischen Abstand von 0.5eV bzw. 0.9eV zum Valenzband, zum Vergleich entsprechende Kennlinie ohne Trapszustände.

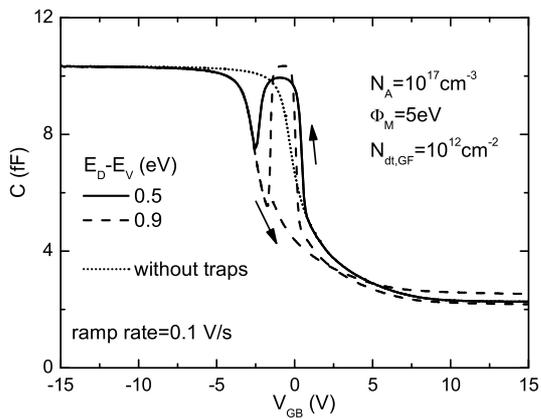


Abbildung 6.21: Simulierte C-V-Kennlinien unter Annahme einer Akzeptordotierung und zusätzlich donatorartiger Grenzflächentraps mit einem energetischen Abstand von 0.5eV bzw. 0.9eV zum Valenzband, zum Vergleich entsprechende Kennlinie ohne Trapszustände.

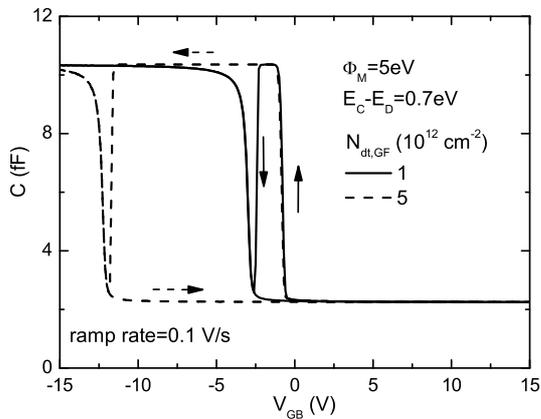


Abbildung 6.22: Simulierte C-V-Kennlinien unter Annahme donatorartiger Grenzflächentraps mit einem energetischen Abstand von 0.7eV zum Leitungsband für zwei verschiedene Trapkonzentrationen, ohne explizite Grunddotierung.

man Abb. 6.11 und Abb. 6.13 vergleicht. Neben der Verschiebung der Kennlinie auf der Spannungsachse tritt insbesondere im Bereich der Verarmung ein völlig unterschiedliches Kennlinienverhalten auf.

In Abb. 6.22 wurden donatorartige Grenzflächenzustände mit einem energetischen Abstand des Trapniveaus zur Leitungsbandkante von 0.7eV berücksichtigt, ohne explizite Grunddotierung. Dargestellt sind Kennlinien für zwei verschiedene Trapkonzentrationen, $1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ bzw. $5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. Dabei ergibt sich mit größerer Konzentration eine breitere Hysterese, da in Anreicherung mehr positiv geladene Donatoren an der Grenzfläche vorliegen. Beginnend in Verarmung, sind die Donatoren neutral und so verlaufen die Kennlinien beim Anstieg der Kapazität zunächst gleich. Aufgrund der geringen Ladungsträgerdichte tritt ein abrupter Übergang auf. Eine signifikante Abhängigkeit der Hystereseform von der Ramprate konnte nicht beobachtet werden.

Die Berücksichtigung von Grenzflächentraps ergab stets einen ausgeprägten Peak in der C-V-Kennlinie. Nicht immer trat dabei eine Hysterese auf. Damit wird also auch durch die Grenzflächentraps das experimentell beobachtete Verhalten nicht wiedergegeben.

6.7 Diskussion

Es wurde gezeigt, dass Umladung von Trapzuständen, sowohl im Bulk als auch an der Grenzfläche lokalisiert, zu Hysteresen führen kann. Die resultierenden Hystereseformen sind jedoch stets qualitativ verschieden vom experimentell beobachteten Verhalten. Zwar bewirken geladene Trapzustände an der Oxidgrenzfläche eine Verschiebung der Flachbandspannung, doch zeigt die Kennlinie in der Regel nicht die experimentell beobachtete Spannungsverschiebung zwischen dem Erreichen der Oxidkapazität für die eine und dem Abfall von der Oxidkapazität für die andere Sweep-Richtung. In den Fällen, in denen die Kennlinie dieses Verhalten zeigt, tritt gleichzeitig ein äußerst abrupter Übergang zwischen Oxid- und geometrischer Kapazität auf, was nicht der experimentellen Beobachtung entspricht. Auch Trapverteilungen ergaben kein qualitativ neues Verhalten. Umladung von Trapzuständen kann also die auftretende Hysterese in organischen Bauelementen nicht erklären. Bewegliche Ionen allein können keine Verschiebung der Flachbandspannung verursachen, sie müßten zumindest noch durch einen weiteren Mechanismus zusätzlich an der Grenzfläche zurückgehalten werden. Wahrscheinlicher scheint eine andere Erklärung. Polaronen und Bipolaronen sind schon seit längerem als Ladungszustände in leitfähigen Polymeren bekannt [103, 104], wenn sie bisher auch für gewöhnlich in der Analyse von organischen Bauelementen oder elektrochemischen Impedanzmessungen ignoriert wurden. Die Ladung eines Ladungsträgers verursacht eine Verformung des Moleküls bzw. der Polymerkette, welche sich dann gemeinsam mit dem Ladungsträger fortpflanzt (Polaron). Bipolaronen sind gepaarte Zustände und besitzen die doppelte Ladung. Es ist ein stark gebundener Zustand, welcher entweder getrappt (also unbeweglich) ist oder aber eine sehr geringe Beweglichkeit besitzt (bei Hopping von einer Polymerkette zur anderen können nicht beide Ladungsträger eines Bipolaron gleichzeitig tunneln). In Ref. [105] wurden Hysterese-Effekte in Polymer-Transistoren auf die Bildung getrappter Bipolaronen zurückgeführt. Unter-

schiede in der Stärke des Effekts wird mit einer unterschiedlichen Bindungsenergie der Bipolaronen erklärt. Ist diese zu klein, tritt überhaupt keine Hysterese auf. Die Bildung von Bipolaronen besitzt wegen der Coulombabstoßung einen kleinen Wirkungsquerschnitt und die Verminderung der Ladungsträgerkonzentration mit der Zeit während der Bipolaronenbildung hängt quadratisch von der Ladungsträgerkonzentration ab (Ratengleichung). Genau diese Abhängigkeit wurde im Experiment beobachtet. Eine große Bindungsenergie der Bipolaronen könnte durch lokale strukturelle Verzerrungen oder an Grenzflächen ermöglicht werden. Weiterhin gibt es auch theoretische Hinweise darauf, dass die direkte Polaronen-Bipolaronen-Reaktion Hysterese-Effekte verursacht. In Ref. [91] wird gezeigt, dass im transmission-line Ersatzschaltbild zur Beschreibung von Kleinsignal-Wechselstrom-Transporteigenschaften die Polaronen-Bipolaronen-Reaktion in völlig analoger Weise zu berücksichtigen ist wie Trapzustände. Somit kann man also ebenfalls Hysterese-Effekte erwarten, allerdings mit einer anderen Abhängigkeit von externen Signalen. Es zeigte sich, dass in Anreicherung die Polaronen-Bipolaronen-Reaktion mit konstanter Relaxationszeit dominiert. Demnach bilden sich Bipolaronen bevorzugt in Anreicherung an der Grenzfläche zum Oxid. In diesem Regime wirkt auch die Coulombabstoßung zwischen den Polaronen möglicherweise nicht mehr in dem Maße hemmend für die Bipolaronenbildung, da die Ladungsträger sehr stark im Bereich der Grenzfläche eingeeengt werden und die Polaronen dazu eine vergleichsweise große Ausdehnung besitzen. Ist die Bindungsenergie der Bipolaronen groß (materialabhängig), können die gebundenen Zustände beim Abbau der Anreicherung ebenfalls nur langsam abgebaut werden. Die an der Grenzfläche verbleibenden zweifach geladenen Bipolaronen-Zustände verursachen dann die beobachtete Verschiebung der Flachbandspannung. Es wird zusätzlich noch ein weiterer möglicher Mechanismus vorgeschlagen, unabhängig von der direkten Polaronen-Bipolaronen-Reaktion. Bei diesem sogenannten dritten Prozeß des Kirowa-Brazovskii Szenarios [91] reagiert ein Komplex aus einem Bipolaron und einem Gegenion mit einem weiteren Gegenion (bewegliche Dotanden) zu einem neutralen Komplex. In Anreicherung werden die Gegenionen teilweise von der Grenzfläche verdrängt und es verbleiben positiv geladene Komplexe. Diese verursachen dann die Verschiebung der Flachbandspannung, da beim Abbau der Anreicherung die Bildung des neutralen Komplexes nur langsam abläuft. Nach dieser Hypothese wird die Hysterese nicht durch einen einzelnen Prozeß allein verursacht, sondern entsteht aus einer Kombination von zwei Prozessen. Dies ist zum einen langsamer Transport, d.h. speziell hier der Antransport von Polaronen oder den beweglichen Gegenionen zur Grenzfläche. Der andere Prozeß ist die direkte Polaronen-Bipolaronen-Reaktion oder aber die Komplexbildungsreaktion entsprechend dem dritten Prozeß des Kirowa-Brazovskii Szenarios. Eine numerische Überprüfung dieser Modellvorstellung ist Gegenstand zukünftiger Arbeit.

Kapitel 7

Ambipolare organische Feldeffekt - Transistoren

Lichtemission kombiniert mit Schalteigenschaften in einem einzelnen Bauelement, also ein leuchtender Feldeffekt-Transistor (LE-FET), würde die Zahl möglicher Anwendungen von organischen optoelektronischen Bauelementen maßgeblich erhöhen. Lichtemission erfordert Injektion und Transport sowohl von Elektronen als auch von Löchern, oft als ambipolarer Transport bezeichnet (nicht zu verwechseln mit ambipolarer Diffusion), wie auch effiziente strahlende Rekombination. Ein Nachweis über ambipolares Verhalten in a-Si:H Dünnschicht-Transistoren (TFTs) wurde bereits vor nahezu dreißig Jahren durch Neudeck und Malhotra beobachtet [106]. Detaillierte Untersuchungen sind frühzeitig durch Pfeiderer *et al.* [107–110], Hack *et al.* [111] und Neudeck *et al.* [95, 112] vorgestellt worden. Hack *et al.* betonen, dass man wesentlich größere Ströme als in einem konventionellen a-Si:H TFT erhält und schlagen die Möglichkeit vor, im sichtbaren Licht leuchtende Transistoren zu fertigen, deren Emission mit hoher Geschwindigkeit moduliert werden kann. Jedoch wird Licht nicht sehr effizient von a-Si:H emittiert, es müsste durch ein anderes Material ersetzt werden. Somit fand dieser neue Bauelementtyp keine Anwendungen. Kürzlich ist ein ambipolarer Schottky-barrier silicon-on-insulator MOS-Transistor mit aussichtsreichen elektrischen Eigenschaften vorgestellt worden [113]. In einem weiteren Artikel [114] wird von ambipolarer Feldeffekt-Ladungsträgerinjektion in organische Isolatoren berichtet. Ambipolarer Transport wurde ebenfalls in doppelwandigen Kohlenstoff-Nanoröhren Feldeffekt-Transistoren bei niedrigen Temperaturen (23K) beobachtet [115].

Hinsichtlich Lichtemission werden organische Materialien mit niedrigem Molekulargewicht und konjugierte Polymere erfolgreich in organischen Leuchtdioden (OLED) eingesetzt [116–118]. Gewöhnlich sind diese Materialien entweder Loch- oder Elektronenleiter oder sie sind unbeabsichtigt *p*- bzw. *n*-dotiert. Verschiedene Ansätze sind möglich, um für den ambipolaren TFT einen ausgeglichenen Elektronen- und Lochtransport und zusätzlich eine effiziente Injektion beider Ladungsträgertypen zu erreichen. Eine kürzlich erfolgreiche Umsetzung basiert auf einem sich durchdringenden Netzwerk aus zwei Materialien [119]. Eine Alternative ist ein organischer Heterostruktur-FET, optimiert, um effiziente Löcher- und Elektroneninjektion als auch *p*- und *n*-Kanal Betrieb zu erreichen. Dodabalapur *et al.* verwendeten α -hexithienylene (α -6T) und C₆₀ als aktive Schichten und identi-

sche Au-Elektroden als Source- und Drainkontakte [120]. In dieser Struktur führt der Gebrauch von symmetrischen Source- und Drainkontakten zu einer Injektionsbarriere für zumindest einen Ladungsträgertyp. In diesem speziellen Fall limitiert die Auswahl von Gold als Kontaktmaterial stark die Elektroneninjektion. In Ref. [121] wurde ein ambipolarer organischer Heterostruktur-FET vorgestellt, bestehend aus Pentacen als Lochtransport-Material und N,N'-Ditridecylperylene-3,4,9,10-tetracarboxylic diimide (P13) als Elektronentransport-Material, kombiniert mit optimierten Source- und Drainelektroden aus Gold bzw. Magnesium. Das Ersetzen von Pentacen durch ein geeigneteres Lochtransport-Material führte zum ersten ambipolaren leuchtenden OFET [122]. Ein anderer leuchtender OFET [123] basiert nicht auf ambipolarem Transport: Schlechte Kontaktausbildung führte zum Auftreten einer OLED-Struktur am Drainkontakt, welche in Reihe mit dem regulären OFET-Kanal ist und letzterer als Anode der OLED fungiert. In Ref. [124] wird von Lichtemission im sichtbaren Bereich in einem Feldeffekt-Transistor auf der Basis des Polymers MEH-PPV bei relativ hohen Spannungen berichtet. Dabei wurden gemischte Al/Au-Elektroden für Source und Drain verwendet.

Bisher basieren die Modelle für ambipolare TFTs [95, 107–110, 112] auf einer modifizierten Pao-Sah Beschreibung [125] eines unipolaren FET oder auf der graduate channel approximation. Dabei werden die mögliche nicht-ohmsche Natur von zumindest einem der Kontakte sowie Rekombination nicht mit berücksichtigt. Die Beschreibung in Ref. [114] basiert auf Ref. [109]. In organischen ambipolaren TFTs ist jedoch beides für die Arbeitsweise entscheidend. Die adäquate Beschreibung des Verhaltens solcher Bauelemente erfordert daher die Verwendung moderner zweidimensionaler (2D) numerischer Simulation. Unter Bezugnahme auf experimentelle Daten eines Heterostruktur-Bauelementes [121] soll in diesem Kapitel eine erste Simulationsstudie für ein Einschicht-Modellsystem vorgestellt werden. Dies führt zu einem angemessenen Verständnis der prinzipiellen Arbeitsweise, klärt den entscheidenden Einfluß der Natur der Kontakte sowie die Abhängigkeit gegenüber Variationen von Materialparametern. Weiterhin werden Möglichkeiten und Einschränkungen für die Datenanalyse mittels einfacher analytischer Ausdrücke aufgezeigt.

In Abschnitt 7.1 werden kurz Eigenschaften von ambipolaren TFTs als Basis für die Simulationen besprochen und die experimentellen Ergebnisse aus Ref. [121] zusammengefaßt, auf welche in den Simulationen Bezug genommen wird. In Abschnitt 7.2 werden das Modellsystem und die Materialparameter angegeben, welche als Standardwerte verwendet werden. Die Ergebnisse werden in Abschnitt 7.3 vorgestellt und diskutiert und die Parameterextraktion wird in Abschnitt 7.4 analysiert. Abschnitt 7.5 faßt die Ergebnisse und Schlußfolgerungen zusammen.

7.1 Eigenschaften ambipolarer Feldeffekt - Transistoren

7.1.1 Bauelement auf der Basis von amorphen Silizium

Die geläufigsten TFTs auf der Basis von a-Si:H arbeiten als unipolares Bauelement entweder mit der Ausbildung eines n -Kanals oder eines p -Kanals. Der Betrieb in Inversion oder in Anreicherung wird durch die Kontakte bestimmt, welche entweder

gleichrichtend oder ohmsch gewählt werden. Ein anderes Konzept ist durch Pfeiderer *et al.* [107–110] eingeführt worden, wobei Source und Drain sowohl für die Majoritäts- als auch die Minoritätsladungsträger ohmsch sind. Diese TFTs zeigen n -Kanal, p -Kanal und ambipolaren Betrieb, abhängig von den angelegten Gate-Source- und Drain-Source-Spannungen. Untersuchungen dazu findet man ebenfalls in Refs. [95, 111, 112].

Das wesentliche Merkmal der Ausgangskennlinien eines ambipolaren Transistors ist ein starkes Ansteigen des Drainstromes für große Drain-Source-Spannungen zusätzlich zum aktiven Bereich und Sättigungsbereich. Das kann folgendermaßen verstanden werden. Für eine negative Gate-Source-Spannung relativ zur Schwellspannung $V_{GS,eff} = V_{GS} - V_{th} < 0$ ist eine Loch-Anreicherungsschicht durch Löcherinjektion an Source und Drain ausgebildet, falls diese Kontakte für Löcher ohmsch sind. Die Elektronen-Inversionsschicht für $V_{GS,eff} > 0$ kann nicht ausgebildet werden, wenn diese Kontakte für Elektronen blockierend sind. Für kleine negative Drain-Source-Spannungen $V_{DS} < 0$ erhält man den Drainstrom I_D im aktiven oder linearen Regime. Dabei wird die Gate-Drain-Spannung effektiv reduziert: $V_{GD} = V_{GS,eff} - V_{DS}$. Nähert sich V_{DS} dem Wert $V_{GS,eff}$, dann wird das Gebiet nahe Drain verarmt und I_D sättigt. Für noch größere negative V_{DS} wird die Bedingung für Inversion nahe Drain erfüllt, aber infolge des für Elektronen blockierenden Drainkontaktes kann dieser Kanal nicht ausgebildet werden. Ersetzt man diesen Kontakt durch einen für Elektronen ohmschen Kontakt [107–110], führt dies zum Elektronen-Inversionskanal nahe Drain für $-V_{DS} > -V_{GS,eff}$ zusätzlich zum Loch-Kanal nahe Source. Der zusätzliche Elektronenstrom resultiert in einem starken Ansteigen des gesamten Drainstromes I_D . Wenn beide, Source und Drain, ohmsch für Elektronen und Löcher sind, bestehen die Transferkennlinien nicht nur aus einem „on“- und einem „off“- Bereich, wie es von unipolaren Transistoren bekannt ist. Stattdessen wird ein „on-off-on“-Verhalten mit steigender Gatespannung beobachtet.

Vorgeschlagene Schaltkreis-Anwendungen dieser Bauelemente, welche die Eigenheiten des ambipolaren Transports ausnutzen, wurden bisher nicht realisiert. Mit der Lochinjektion an einem Kontakt und Elektroneninjektion am anderen wird Rekombination entscheidend für die Arbeitsweise. Die Kombination von Schalten und Lichtemission durch strahlende Rekombination, wie in Ref. [111] vorgeschlagen, erfordert den Ersatz von a-Si:H durch einen geeigneten Emitter.

7.1.2 Heterostruktur-OFET mit asymmetrischen Source- und Drainkontakten

Bei organischen Materialien als aktives Material sind Source und Drain gewöhnlich Metalle. In diesem Fall ist ein ohmscher Kontakt (oder Anreicherungskontakt) für eine Art von Ladungsträger notwendigerweise ein Schottky-Kontakt für die andere Ladungsträgerart. Daher liefert der Elektronen-Kanal des organischen ambipolaren Heterostruktur-FET in Ref. [120] einen relativ geringen Strom, da für Source und für Drain Gold verwendet wurde. Der Aufbau in Ref. [121] kombiniert das Prinzip der Heterostruktur (basierend auf der Annahme, dass eine Schicht als Elektronen-Transportmaterial dient, die andere als Loch-Transportmaterial) mit der Verwendung von verschiedenen Kontakten für Source und Drain, einer zur Elektroneninjektion und der andere zur Löcherinjektion. Zusätzlich verbessert die größere Affi-

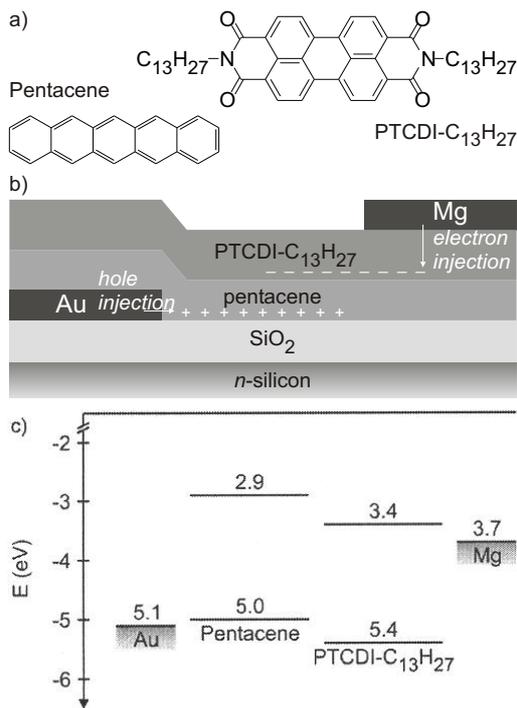


Abbildung 7.1: Molekulare Struktur der organischen Materialien Pentacene und N,N'-Ditridecylperylene-3,4,9,10-tetracarboxylic diimide (P13) (a). Querschnitt des organischen Heterostruktur-FET (b). Gezeigt ist die schematische Ausbildung des *p*- und *n*-Kanals (wie in Ref. [121] vorgeschlagen), um die feldinduzierte Ladungsverteilung bei negativer Gate-Source-Spannung V_{GS} und Drain-Source-Spannung V_{DS} mit $|V_{DS}| > |V_{GS} - V_{th}|$ zu illustrieren. Energieniveaus (HOMO und LUMO) von Pentacene [126] und P13 [129] sowie die Austrittsarbeiten der beiden Metallkontakte Au und Mg [128] (c).

nität der Elektronen-Transportschicht mit Kontakt zum Material mit der kleineren Austrittsarbeit die Elektroneninjektion.

In den Heterostruktur-OFETs in Ref. [121] wurde Pentacene als Loch-Transportmaterial und N,N'-Ditridecylperylene-3,4,9,10-tetracarboxylic diimide (P13) als Elektronen-Transportmaterial verwendet. Die Molekülstrukturen und der schematische Querschnitt des Bauelementes sind in den Abbildungen 7.1a und 7.1b dargestellt. Die Präparation des Bauelementes als auch der Meßaufbau wurde im Detail in Ref. [121] beschrieben. Dieses Bauelement ist ein FET, welcher asymmetrisch bezüglich der Source- und Drainkontakte als auch der beiden aktiven organischen Schichten ist (Abb. 7.1b). Die Kanallänge und -weite des Heterostruktur-OFET sind $140\mu\text{m}$ und $2000\mu\text{m}$. Die energetischen Niveaus des höchsten besetzten Molekülorbitals (HOMO) und des niedrigsten unbesetzten Molekülorbitals (LUMO) von Pentacene und P13 sowie die Austrittsarbeiten von Gold und Magnesium als Kontaktmaterialien sind in Abb. 7.1c schematisch dargestellt. Die angegebenen Werte sind teils mit Unsicherheiten behaftet, zumindest $\pm 0.1\text{eV}$. Das HOMO-Level von Pentacene liegt bei 5.0eV [126] bis 5.07eV [127] unterhalb des Vakuum-Niveaus und liegt nahezu auf Höhe der Austrittsarbeit von Au bei etwa 5.1eV [128], was eine effiziente Injektion von Löchern in die Pentacene-Schicht ermöglicht. Mg mit seiner Austrittsarbeit von 3.7eV [128] wird als Injektionskontakt für Elektronen gewählt, um die Barriere für die Elektroneninjektion in das LUMO-Level von P13 bei 3.4eV [129] zu reduzieren. Die direkte Injektion ins Pentacene mit dem LUMO-Level bei 2.9eV [126] bis 3.22eV [127] wäre folglich weniger günstig.

Die ambipolaren Kennlinien des Heterostruktur-OFETs aus Ref. [121] sind in Abb. 7.2 dargestellt, die Ausgangskennlinien für den Fall mit Au als Sourcekontakt in Abb. 7.2a und mit Mg als Sourcekontakt in Abb. 7.2b, jeweils für die gleiche Polarität

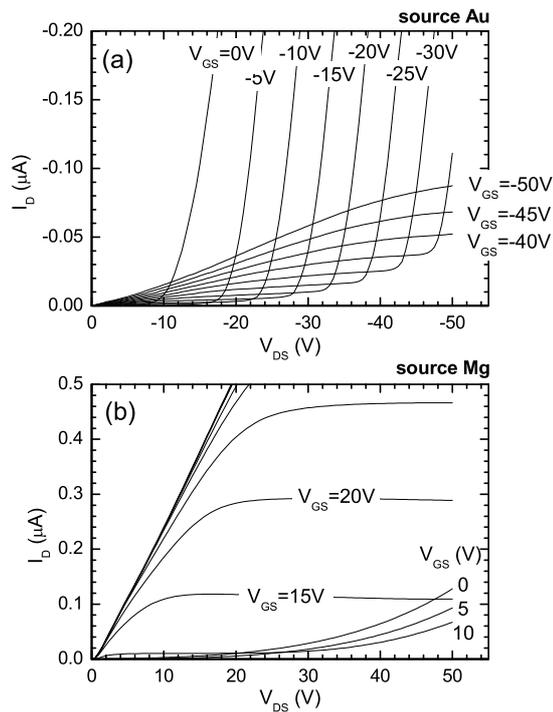


Abbildung 7.2: Ausgangskennlinien des Heterostruktur-OFET mit dem Sourcekontakt Au (a) oder Mg (b). Mit Au (Mg) als Source wurden sowohl die Gate-Source- als auch die Drain-Source-Spannungen negativ (positiv) gewählt, dies führt zu einem p -Kanal (n -Kanal) für kleine Drain-Source-Spannungen.

der Drain-Source- und Gate-Source-Spannung (mehr Details in Ref. [121]). Sowohl für Au als Source und negative V_{DS} als auch für Mg als Source und positive V_{DS} ist der Mg-Kontakt negativ relativ zum Au-Kontakt. Für Au als Source (Abb. 7.2a) und negativer Gatespannung V_{GS} werden für negative Drain-Source-Spannungen mit $|V_{DS}| \leq |V_{GS,eff}|$ typische p -Kanal Kennlinien beobachtet. Mit steigender $|V_{DS}|$ wird ein plötzlicher steiler Anstieg des Drainstromes I_D gemessen, welcher ein typisches Merkmal für den ambipolaren Betrieb ist (siehe auch Refs. [119], [120], [121]). Die Richtung der nahezu parallelen Verschiebung dieses steil ansteigenden Stromes mit zunehmender negativer Gatespannung weist deutlich auf einen Elektronenstrom hin, welcher somit bei Mg-Drain injiziert werden muß. Vom Einsatz dieses Anstieges für verschiedene Gate-Source-Spannungen erhält man etwa $V_{th} \approx +12V$ (aus $|V_{DS}| = |V_{GS} - V_{th}|$). Als eine weitere Eigenheit findet man, dass der steile Anstieg des Elektronenstromes für größere Drainspannungen nahezu linear verläuft. Für Mg als Source und eine positive Gatespannung (Abb. 7.2b) tritt neben der Ausbildung des n -Kanals bei kleinen Drain-Source-Spannungen wieder ein zusätzlicher Strom bei größerer Drain-Source-Spannung auf, welcher durch Löcherinjektion bei Au-Drain entsteht. Dieser tritt jedoch nur für $V_{GS} \leq 10V$ auf, d.h. für $V_{GS,eff} \leq 0V$, und die Abhängigkeit von der Drainspannung ist nun nahezu quadratisch. Dieser zusätzliche Lochstrom wird erst nach einem gewissen Spannungsbereich oberhalb des Übergangs des Elektronenstromes in die Sättigung dominierend. Das ist ein Unterschied zum Fall mit Au-Source, wo der zusätzliche Elektronenstrom etwa am Übergang des Lochstromes in die Sättigung zu dominieren beginnt. Folglich kann der Einsatz beider Injektionsströme nicht durch die gleiche V_{th} beschrieben werden. Für Mg-Source ist weiterhin der n -Kanal Transistorstrom in diesem Fall viel größer als der p -Kanal Transistorstrom für Au-Source. Allerdings steigt dieser n -Kanal

Strom in Sättigung nahezu linear mit steigender Gatespannung an, im Gegensatz zur gewöhnlichen quadratischen Abhängigkeit. Für größere Gate-Source-Spannungen ist der Anstieg sogar sub-linear (nicht in der Abbildung gezeigt).

Schließlich treten auch Abweichungen vom gewöhnlichen Strom-Spannungs-Kennlinienverhalten bei kleiner Drain-Source-Spannung auf: Für Au als Source (Abb. 7.2a) tritt ein allmählicher Anstieg des Stromes mit positiver Krümmung auf, erst ab einer bestimmten Drain-Source-Spannung tritt ein Wechsel zur üblichen negativen Krümmung ein. Andererseits ist die Abhängigkeit des Stromes von der Gatespannung für kleine Drain-Source-Spannungen (aktive Bereich) für Mg-Source (Abb. 7.2b) nur schwach, sub-linear statt der üblichen linearen Abhängigkeit. Der allmähliche Anstieg des Stromes wurde oft Serienwiderständen zugeschrieben [130]. Im Gegensatz dazu ist jedoch z.B. in Refs. [35, 81] gezeigt worden, dass Kontaktwiderstände gerade die sub-lineare Gatespannungsabhängigkeit zur Folge haben. Die Simulationen in Kapitel 4 ([E5]) führten zur gleichen Schlußfolgerung. Zusätzliche Serienwiderstände wirken in die gleiche Richtung.

7.2 Zwei-dimensionale Simulation

7.2.1 Modellsystem

Die Zweischicht-Bauelementstruktur (Abb. 7.1b) wurde in Ref. [121] und früher von Dodabalapur *et al.* [120] verwendet, um die guten Transporteigenschaften von Elektronen und Löchern verschiedener Materialien auszunutzen. Weiterhin könnte in der Struktur nach Abb. 7.1b noch wesentlich sein, dass die größere Affinität der Elektronen-Transportschicht Elektroneninjektion am Mg-Kontakt begünstigt. Ob der Heteroübergang zwischen den beiden aktiven Schichten vorteilhaft ist oder nicht, ist bisher noch nicht geklärt worden. Zusätzlich befindet sich in dieser Struktur (Abb. 7.1b) der Kontakt mit der kleineren Austrittsarbeit in einem gewissen Abstand zum Kanal, was in einen ohmschen Widerstand resultiert. Für ein grundsätzliches Verständnis der Prozesse in einem ambipolaren (double-injection) Transistor sowie der entscheidenden Parameter, die das Verhalten bestimmen, soll in einem ersten Schritt eine vereinfachte Einschicht-Modellstruktur analysiert werden. Diese ist in Abb. 7.3 dargestellt, mit Source und Drain als bottom-Kontakte deren Kontaktmaterialien Metalle mit verschiedenen Austrittsarbeiten sind.

Die Abmessungen wurden analog zum experimentellen Zweischicht-System gewählt. Die Dicke der organischen Schicht beträgt somit $d_{\text{org}} = 30\text{nm}$, die Source- und Drainkontakte sind ebenfalls 30nm dick. Die Kanallänge ist $L = 140\mu\text{m}$ (simulierte Länge inklusive der Source- und Draingebiete $160\mu\text{m}$). In den Simulationen beträgt die Kanalweite generell $w = 1\mu\text{m}$. Die SiO_2 Gateisolatorschichtdicke ist $d_{\text{ox}} = 150\text{nm}$ mit einer relativen dielektrischen Konstante von

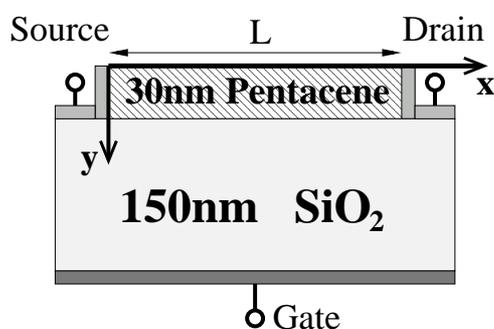


Abbildung 7.3: Einschicht - Modellstruktur

$\varepsilon_{\text{ox}} = 3.9$. Für die aktive organische Schicht wurde eine Modellschicht eingeführt mit Parametern wie für Pentacen, allerdings wurden die Elektronen- und Lochbeweglichkeiten willkürlich variiert. Im folgenden wird diese Modellschicht mit ‚Pentacen‘ bezeichnet. Zusätzlich ist als ein Referenzsystem eine Diode betrachtet worden, welche im wesentlichen die gleiche Struktur wie der Modell-Transistor in Abb. 7.3 hat, jedoch ohne Gatekontakt und Gatedielektrikum.

7.2.2 Standard-Materialparameter

Die Materialparameter der Pentacen-Schicht wurden folgendermaßen gewählt: relative dielektrische Konstante $\varepsilon = 3.5$, Elektronenaffinität $\chi = 3.22\text{eV}$, Bandlücke $E_g = 1.85\text{eV}$ [127], effektive Zustandsdichte $N_C = N_V = 10^{21}\text{cm}^{-3}$ (Monomerdichte). Es wurden konstante Beweglichkeiten für Elektronen und Löcher angenommen, die absoluten Werte jedoch variiert. Als Standardwerte werden $\mu_n = 1.2 \times 10^{-3}\text{cm}^2/\text{Vs}$ und $\mu_p = 1.2 \times 10^{-4}\text{cm}^2/\text{Vs}$ verwendet. Das Material wird als intrinsisch angenommen. Zum Vergleich wurden jedoch auch Rechnungen mit einer Grunddotierung von $N_A^- = 10^{16}\text{cm}^{-3}$ und 10^{17}cm^{-3} durchgeführt. Zusätzlich wurde direkte Rekombination berücksichtigt. Für organische Materialien mit geringer Ladungsträgerbeweglichkeit ist der bimolekulare Langevin Rekombinationsmechanismus relevant [63, 131], die Rekombinationsrate ist durch Gleichungen (3.17) und (3.18) gegeben. Zum Vergleich wurde auch eine Rechnung ohne Berücksichtigung eines Rekombinationsprozesses durchgeführt. Das Gate-Kontaktmaterial wird durch seine Austrittsarbeit charakterisiert. Es wurde ein Wert von 4.08eV gewählt, was der Verwendung von $n^+ - \text{Si}$ mit einer Dotierung von $N_D = 8 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ als Gate-Kontaktmaterial entspricht. Da nur die Flachbandspannung direkt beeinflusst wird, ist der exakte Wert nicht von großer Bedeutung. Im Gegensatz dazu sind die Austrittsarbeiten der (metallischen) Source- und Drainkontakte entscheidende Größen. Die Austrittsarbeiten von Source und Drain sind unterschiedlich, um an einem Kontakt Lochinjektion und am anderen Elektroneninjektion zu ermöglichen. Für einen Kontakt (Au) wurde daher 5.0eV verwendet, was nahe dem Valenzband (HOMO) von Pentacen liegt. Die Austrittsarbeit des anderen Kontaktes (Mg) wurde zwischen 3.68eV und 3.57eV variiert. Als Standardwert wird 3.635eV verwendet. Die Differenz zwischen der Austrittsarbeit und der Energie der Transportzustände, d.h. χ für Elektronen und $(\chi + E_g)$ für Löcher (χ ist die Elektronenaffinität) wirkt als Kontaktbarriere. Mögliche Dipolschichten oder Fermi-Level pinning könnten durch eine korrigierte Austrittsarbeit modelliert werden. Für jeden Parametersatz sind einmal Simulationen mit Au als Sourcekontakt und einmal mit Mg als Sourcekontakt durchgeführt worden. Alle Ergebnisse entsprechen einer Temperatur von 300K .

Für die Standard-Barrieren beträgt die Löcherdichte am Au-Kontakt $6.6 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$, die Elektronendichte am Mg-Kontakt ist dagegen mit $1.0 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$ relativ gering. Der Au-Kontakt ist somit ein Anreicherungskontakt für Löcher, seine Eigenschaften bleiben unverändert für kleine Variationen seiner Austrittsarbeit. Am Mg-Kontakt liegt hingegen Verarmung vor, sobald der Elektronenkanal ausgebildet ist und der Elektronenstrom wird empfindlich vom exakten Wert der Mg-Austrittsarbeit abhängig sein. Weiterhin ist das Auftreten eines Elektronenstromes injiziert bei Mg gemeinsam mit einem Löcherstrom injiziert bei Au vom Verhältnis der Elektronen- und Lochbeweglichkeiten abhängig. Die verwendeten Standardpara-

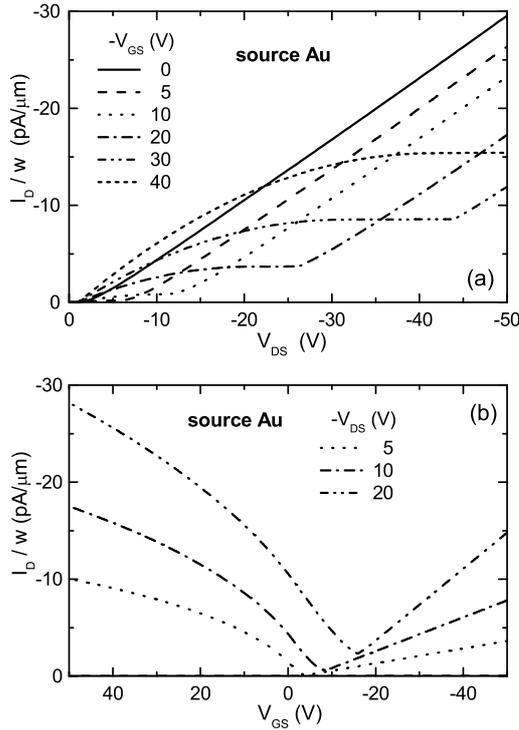


Abbildung 7.4: Simulierte Ausgangs- (a) und Transferkennlinien (b) für Source am Au-Kontakt. Standardparameter entsprechend Abschnitt 7.2.2 wurden verwendet: Au-Austrittsarbeit 5.0eV (Barriere für Löcher 0.07eV), Mg-Austrittsarbeit 3.635eV (Barriere für Elektronen 0.415eV), $\mu_p = 1.2 \times 10^{-4}$, $\mu_n = 1.2 \times 10^{-3}$, direkte Langevin Rekombination, undotierte organische Schicht. Der Drainstrom ist pro Einheit der Kanalweite angegeben.

meter sind derart gewählt worden, dass eindeutig ambipolare Kennlinien auftreten.

7.3 Ergebnisse

7.3.1 Ambipolare Strom-Spannungs-Kennlinien

Simulierte Strom-Spannungs-Kennlinien mit den oben definierten Standardparametern sind in Abb. 7.4 für Au-Source und in Abb. 7.5 für Mg-Source dargestellt. Die Ausgangskennlinien sind im oberen Teil (a) und die Transferkennlinien im unteren Teil (b) gezeigt. Die Ausgangskennlinien zeigen qualitativ das gleiche Verhalten wie die experimentellen Kennlinien der asymmetrischen Heterostruktur (Abb. 7.2), allerdings gibt es auch Unterschiede. Beides wird im folgenden diskutiert.

In den Ausgangskennlinien mit Au als Source (Abb. 7.4a, ähnlich wie in Abb. 7.2a) ergeben sich für negative V_{GS} und kleine negative Drain-Source-Spannung die typischen p -Kanal Kennlinien bis zum Übergang in die Sättigung. Für größere $|V_{DS}|$ beginnt abrupt der nahezu lineare steile Anstieg des Stromes. Die Abhängigkeit von der Gatespannung weist auf einen Elektronenstrom hin, man findet eine beinahe äquidistante Verschiebung mit V_{GS} . Der Einsatz dieses Anstieges ist bei deutlich kleineren Drainspannungen als in Abb. 7.2a mit einer niedrigeren Schwellspannung von $V_{th} \approx +3$ V. Eine Verschiebung dieser Einsatzspannung zu größeren (negativen) Drain-Source-Spannungen kann durch eine negative Grenzflächenladung verursacht werden (siehe Abschnitt 7.3.3). Die Transferkennlinien (Abb. 7.4b) zeigen für eine (kleine) negative Drain-Source-Spannung und negative Gate-Source-Spannung für den p -Kanal die übliche lineare Abhängigkeit des aktiven Bereichs und beim

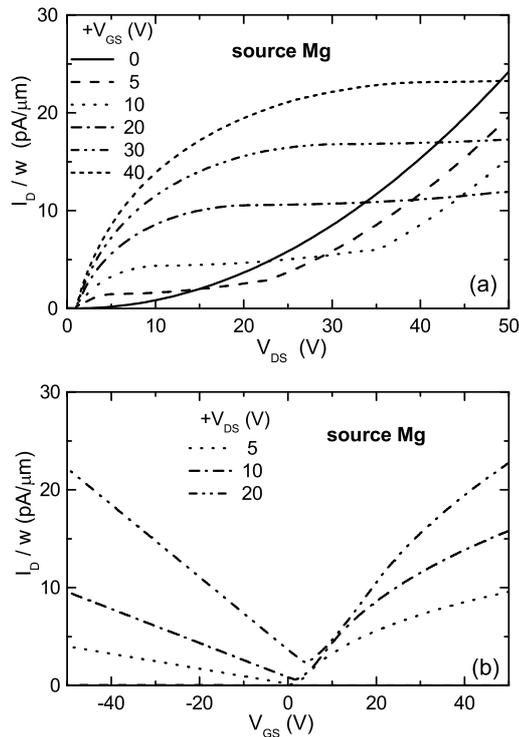


Abbildung 7.5: Simulierte Ausgangs- (a) und Transferkennlinien (b) für Source am Mg-Kontakt. Standardparameter wie in Abb. 7.4.

Wechsel der Gate-Source-Spannung in positive Richtung tritt anstatt der quadratischen Abhängigkeit des Sättigungsbereiches der Einsatz des Elektronenstromes auf. Dieser wird aufgrund der größeren Elektronenbeweglichkeit mit zunehmender positiver Gate-Source-Spannung größer als der Lochstrom. Weiterhin wird dann die Abhängigkeit dieses Stromes von der Gatespannung sub-linear, wie man es von einem nicht-ohmschen Elektronen-Injektionskontakt (hier Mg-Drain) erwartet. Obwohl ein Minimum im Strom auftritt, gibt es keinen echten „off“-Zustand.

Die Ausgangskennlinien für Mg als Source und positive Gate-Source-Spannung (Abb. 7.5a) zeigen die Ausbildung des n -Kanals bei kleinen Drainspannungen, wiederum entsteht ein zusätzlicher Strom für größere Drain-Source-Spannungen durch Löcherinjektion bei Au-Drain. Wie in Abb. 7.2b wird dieser Einsatz mit zunehmender Gatespannung zu größeren Drainspannungen hin verschoben und ist nur für kleine Gate-Source-Spannungen sichtbar. Wie im Experiment ist die Abhängigkeit des Lochstromes von der Drainspannung nahezu quadratisch und der n -Kanal Strom steigt in Sättigung beinahe linear mit der Gate-Source-Spannung an im Gegensatz zur üblichen quadratischen Abhängigkeit. Das ist ebenfalls in den Transferkennlinien (Abb. 7.5b) sichtbar, welche für größere positive Gate-Source-Spannungen sub-linear verlaufen (wie für Au-Source in Abb. 7.4b). Der Lochkanal-Strom zeigt wieder eine lineare Abhängigkeit von der Gatespannung.

Das simulierte Modellsystem zeigt somit tatsächlich qualitativ die charakteristischen Eigenheiten des ambipolaren Verhaltens, welche für die asymmetrische Heterostruktur gemessen wurden. Der Ursprung dieser mannigfaltigen Eigenheiten kann jedoch im Detail nur mittels der inneren Feld- und Konzentrationsprofile verstanden werden, diese sind Gegenstand des nächsten Abschnitts.

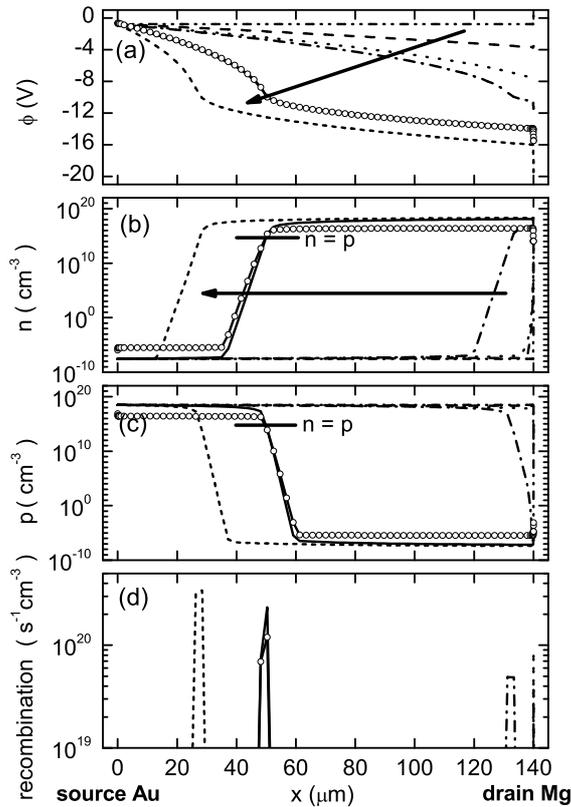


Abbildung 7.6: Profile des Potentials (a), Elektronenkonzentration (b), Lochkonzentration (c) und Rekombination (d) entlang des Kanals von Au-Source nach Mg-Drain für die $V_{GS} = -10V$ Kennlinie von Abb.7.4a. Linien kennzeichnen Profile 1nm oberhalb der Grenzfläche zum Oxid für eine Variation $-V_{DS} = 0(4)20V$, indiziert durch den Pfeil. Die Linie mit Symbol gilt für $-V_{DS} = 16V$ und 1nm unterhalb der Grenzfläche zum Vakuum.

Die beiden gemessenen Abweichungen vom gewöhnlichen Kennlinienverhalten bei kleinen Drain-Source-Spannungen, d.h. der allmähliche Einsatz des Stromes mit positiver Krümmung für Au-Source und die relativ schwache Abhängigkeit von der Gatespannung für Mg-Source, treten aufgrund der vereinfachten Beschreibung der Kontakte in den Simulationen nicht auf.

7.3.2 Innere Feld- und Konzentrationsverteilungen: Analyse der ambipolaren Arbeitsweise

Die innere Bauelementephysik wird durch drei Variablen beschrieben, das sind das elektrische Potential sowie die Elektronen- und Löcherkonzentrationen. Sie sind in Abb.7.6 a bis c für Source am Au-Kontakt entlang des Kanals direkt an der Grenzfläche zum Gateoxid dargestellt. Die Gate-Source-Spannung beträgt $-10V$ und die negative Drain-Source-Spannung wurde variiert, die entsprechende Strom-Spannungs-Kennlinie ist in Abb.7.4 gezeigt. Für $-V_{DS} \leq 8V$ verläuft das Potential linear (aktive Bereich des Transistors), die Elektronenkonzentration ist vernachlässigbar und der p -Kanal ist mit einer Konzentration von $\approx 3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ausgebildet, diese ist kleiner als die Konzentration am Au-Kontakt. Bei $-V_{DS} = 12V$ fällt das Potential zunächst wie beim Übergang in die Sättigung am Mg-Kontakt ab, dann jedoch ändert sich die Krümmung, was das Auftreten des Elektronenkanals mit einer Ausdehnung von $\approx 6\mu\text{m}$ anzeigt. In diesem Gebiet verschwindet der Lochkanal. Für $-V_{DS} = 16V$ ist der Elektronenkanal bereits über $\approx 90\mu\text{m}$ ausgedehnt, der

Lochkanal wird entsprechend kürzer. Bei $-V_{DS} = 20V$ ist der Elektronenkanal noch weiter ausgedehnt, die Verschiebung jedoch geringer als im vorherigen Schritt. Der Strom-Spannungskennlinie (Abb. 7.4a) entnimmt man, dass der Elektronenstrom bereits bei etwa $-V_{DS} = 12V$ zu dominieren beginnt. Dies erscheint merkwürdig, da bei dieser Spannung der n -Kanal nahe Mg noch relativ kurz ist. Der Grund für diese Dominanz des kurzen Elektronenkanals ist, dass die Beweglichkeit der Elektronen um einen Faktor 10 größer als die der Löcher gewählt wurde. Wie erwartet, tritt die Rekombination gerade am Übergang zwischen beiden Kanälen auf, d.h. für $n \approx p$, wie in Abb. 7.6d dargestellt. Folglich wird die Rekombinationszone mit zunehmender Drain-Source-Spannung durch den Kanal in Richtung Au-Source verschoben, die Rekombinationsrate nimmt dabei etwas zu. Die Länge der Rekombinationszone beträgt nur einige μm . Für $-V_{DS} = 16V$ sind die Konzentrationen und die Rekombinationsrate ebenfalls in der Nähe der äußeren Oberfläche ($y = 0$) der 30nm dicken Schicht gezeigt (Symbole). In den jeweiligen Gebieten der beiden Anreicherungskanäle fallen die Konzentrationen über der Schicht etwa um zwei Größenordnungen von $2...3 \times 10^{18} cm^{-3}$ auf $2...3 \times 10^{16} cm^{-3}$ ab. Der elektrische Strom ist auf die Anreicherungsschicht beschränkt, welche weniger als 10nm dick ist. Die maximale Rekombination (bei $x \approx 49.8 \mu m$ für $-V_{DS} = 16V$) tritt jedoch an der Grenzfläche zum Oxid bei einem relativ niedrigen Wert von etwa $n = p \approx 5 \times 10^{14} cm^{-3}$ auf (Abb. 7.6 b und c), was wesentlich geringer ist als die erwähnte Elektronen- und Lochkonzentration an der äußeren Oberfläche innerhalb der jeweiligen Kanalgebiete. Daher sind genügend Ladungsträger an der äußeren Oberfläche, um nahezu den gleichen Wert $n = p$ wie an der Grenzfläche zum Oxid zu liefern, folglich ist die Rekombinationsrate über der Schicht fast konstant. Simulationen für dickere Schichten (100nm) zeigten, dass aufgrund des weiteren Abfalls der Konzentrationen über der Schicht, die Rekombination ebenfalls beginnt, zur äußeren Oberfläche der Schicht hin stärker abzunehmen. Analog reduziert sich für eine (höhere) Dotierung aufgrund der geringeren Ausdehnung der Verarmungslänge die Rekombinationszone senkrecht zur Schicht ebenfalls.

Für den Fall von Mg-Source (n -Kanal bei kleiner Drainspannung) sind die entsprechenden Abhängigkeiten in Abb. 7.7 dargestellt, Source und Drain wurde ausgetauscht und das Potential ändert sein Vorzeichen. Es tritt ein signifikanter Unterschied zum vorherigen Fall auf. Verursacht durch die größere Elektronenbeweglichkeit, ist die Länge des n -Kanals selbst bei $V_{DS} = 20V$ größer als das Gebiet der injizierten Löcher nahe Drain (Au). In der Strom-Spannungskennlinie für $V_{GS} = 10V$, beginnt der Lochstrom daher erst oberhalb von $V_{DS} \approx 35V$ zu dominieren. Aus dem gleichen Grund verschiebt sich die Rekombinationszone nicht so schnell von Drain nach Source. Weiterhin ist die Rekombination nahe der löcherinjizierenden Au-Elektrode bei einer Drain-Source-Spannung, bei welcher der Lochstrom in der Kennlinie (Abb. 7.5a) noch nicht sichtbar ist, größer und fällt dann mit weiterem Ansteigen von V_{DS} ab.

Dennoch können diese Unterschiede zwischen den Potential- und Dichteprofilen und ihr Zusammenhang mit den Strom-Spannungskennlinien nicht die auffallenden Unterschiede zwischen den Elektronen- und Lochströmen erklären, wie sie im vorherigen Abschnitt beschrieben wurden. In der Tat gibt es einen weiteren in den Abb. 7.6a und 7.7a sichtbaren Unterschied: Unmittelbar am Mg-Kontakt (als Source oder als Drain) tritt ein abrupter Potentialabfall auf, welcher mit $|V_{DS}|$

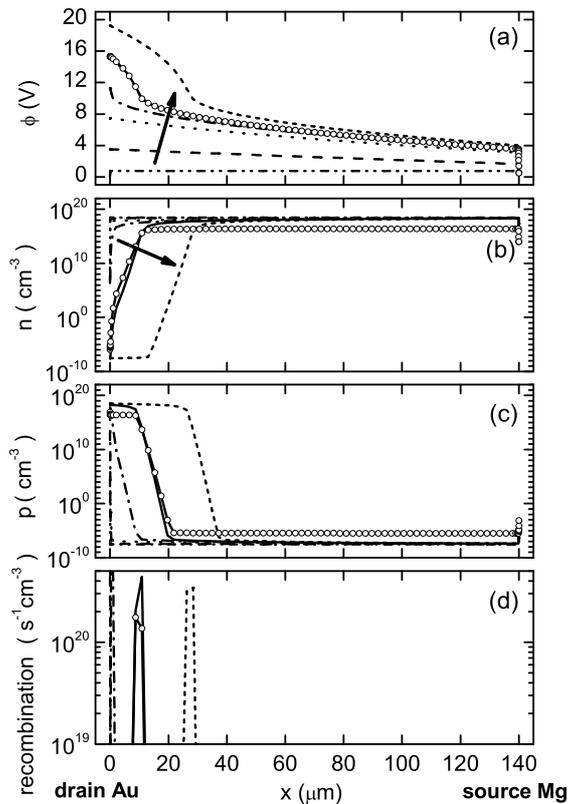


Abbildung 7.7: Profile des Potentials (a), Elektronenkonzentration (b), Lochkonzentration (c) und Rekombination (d) entlang des Kanals von Au-Drain nach Mg-Source für die $V_{GS} = +10V$ Kennlinie von Abb. 7.5a. Linien kennzeichnen Profile 1nm oberhalb der Grenzfläche zum Oxid für eine Variation $V_{DS} = 0(4)20V$, indiziert durch den Pfeil. Die Linie mit Symbol gilt für $V_{DS} = 16V$ und 1nm unterhalb der Grenzfläche zum Vakuum.

ansteigt, am Au-Kontakt hingegen tritt ein solcher Potentialabfall nicht auf. Wie bereits erwähnt, ist die Löcherkonzentration am Au-Kontakt größer als im Anreicherungskanal, folglich liefert dieser Kontakt einen Überschuss an Löchern. Der Mg-Kontakt ist für Löcher ein in Durchlaßrichtung gepolter Schottky-Kontakt. Unter dieser Bedingung erhält man für Au-Source die gewöhnlichen p -Kanal Transistor-kennlinien (Abb. 7.4, kleine $|V_{DS}|$). Mit Au als Drain und $|V_{DS}|$ hinreichend groß, so dass der Lochkanal dominiert, wirkt das Bauelement ähnlich einer in Durchlaßrichtung gepolten Diode unter Raumladungsbegrenzung, was zu einer quadratischen $|V_{DS}|$ -Abhängigkeit wie beim raumladungsbegrenztem Strom (SCLC) führt. Gleichwohl modifiziert das Vorhandensein der Gateelektrode die Arbeitsweise entscheidend, wie im Abschnitt 7.4 noch diskutiert wird. Für den Elektronen injizierenden Mg-Kontakt ist die Situation anders. In Abbn. 7.8 und 7.9 sind die Elektronendichten aus Abbn. 7.6b und 7.7b in unmittelbarer Nähe dieses Kontaktes gezeigt, ein relativ kleiner Bereich von 400nm vom insgesamt $140\mu\text{m}$ langen Kanal. Für Mg als Source-Kontakt (Abb. 7.9) besteht der n -Kanal aufgrund der angelegten Gate-spannung und infolge der Mg-Austrittsarbeit ist dieser Kontakt ein für Elektronen in Sperrichtung gepolter Schottky-Kontakt mit einer für zunehmende V_{DS} anwachsenden Verarmungszone. Diese Verarmungszone bei Source limitiert den n -Kanal Transistorstrom, wie im Zusammenhang mit Abb. 7.5 diskutiert und ist ebenfalls für die nicht-quadratische Abhängigkeit des Stromes von der Gatespannung verantwortlich. Der Effekt eines Schottky-Kontaktes für Source wurde bereits in Kapitel 4 ([E5]) beschrieben. Für Mg als Drain (Abb. 7.8) bildet sich der n -Kanal nur

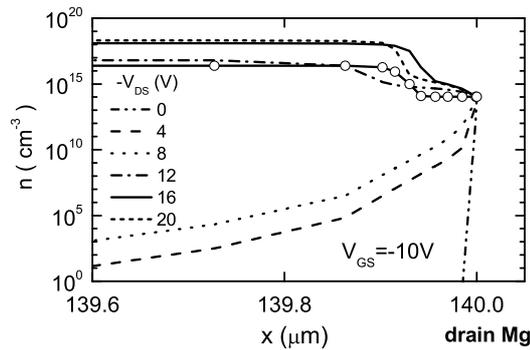


Abbildung 7.8: Ausschnitt der Elektronenkonzentration aus Abb.7.6b unmittelbar bei Mg-Drain.

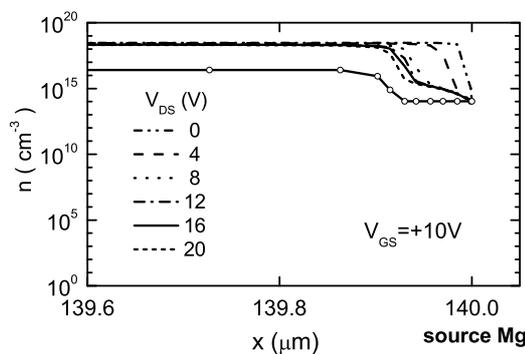


Abbildung 7.9: Ausschnitt der Elektronenkonzentration aus Abb.7.7b unmittelbar bei Mg-Source.

bei größerer $|V_{DS}|$ aus, aber wiederum erhält man einen in Sperrichtung gepolten Schottky-Kontakt zu diesem Kanal. Die Verarmungszone wächst mit zunehmender $|V_{DS}|$ (man vergleiche $-16V$ und $-20V$). Die begrenzte Verarmungszone mit einer Ausdehnung von etwas weniger als $100nm$ in Reihe mit dem langen Anreicherungskanal wirkt effektiv als ohmscher Widerstand mit einer linearen Abhängigkeit von der Drain-Source-Spannung.

Alle erwähnten Eigenschaften treten für den gewählten Parametersatz auf, speziell das gewählte Verhältnis der Beweglichkeiten und der Austrittsarbeiten beider Kontakte. Variationen dieser und anderer Parameter werden im folgenden diskutiert.

7.3.3 Variation von Dotierung, Kontakteigenschaften, Beweglichkeiten und Rekombination

Einfluß der Dotierung

Wie gezeigt, liefern die Simulationen für das Einschicht-Modellsystem ohne Dotierung der aktiven Schicht bereits im wesentlichen die gemessenen ambipolaren Kennlinien des Heterostruktur-Bauelementes. Da die aktiven Schichten im Vakuum abgeschieden wurden, scheint eine niedrige oder vernachlässigbare Dotierung plausibel. Das könnte nicht zutreffend sein, wenn ein konjugiertes Polymer verwendet wird, welche oft unbeabsichtigt p -dotiert sind. Simulationen wurden unter Berücksichtigung zusätzlicher vollständig ionisierter Akzeptoren mit einer Dichte

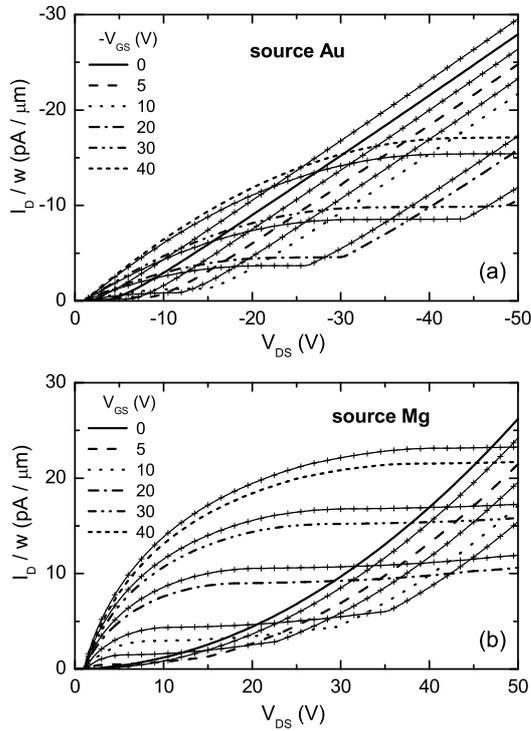


Abbildung 7.10: Simulierte Ausgangskennlinien für Source am Au-Kontakt (a) und Source am Mg-Kontakt (b) ohne Dotierung (mit Symbolen) wie in Abbn. 7.4a und 7.5a und mit vollständig ionisierten Akzeptoren der Dichte 10^{17}cm^{-3} (ohne Symbole).

von $N_A^- = 10^{16}\text{cm}^{-3}$ und 10^{17}cm^{-3} durchgeführt. Die resultierenden Modifikationen der Strom-Spannungs-Kennlinien waren für die niedrigere Dotierung minimal. Für die größere Dotierung werden die Ausgangskennlinien in Abb. 7.10 mit jenen ohne Dotierung aus den Abbn. 7.4a und 7.5a verglichen. Offensichtlich gibt es keine qualitative Veränderung, in beiden Fällen ist der Lochstrom allerdings geringfügig erhöht und der Elektronenstrom verringert. Dabei ist der Einsatz der bei Drain injizierten Ströme bis zu einigen Volt verschoben. Dies stimmt nahezu mit einer Verschiebung der Schwellspannung von $\Delta V_{th} = \Delta V_{FB} + eN_A^- d_{org}/C_{ox}'' - 2\phi_{bulk}(d_{org}/l_{dep})^2$ überein (siehe Gleichung (2.3), d_{org} Dicke der organischen Schicht, l_{dep} Verarmungslänge, C_{ox}'' Oxidkapazität, ϕ_{bulk} Bulk-Potential). Für die gegebenen Parameter und der Dotierung in Abb. 7.10 erhält man $\Delta V_{th} = 1.5\text{V}$.

Variation des Mg-Kontaktes

Der Einfluß einer Variation der Mg-Austrittsarbeit im begrenzten Bereich von $\Phi_{Mg} = 3.57...3.68\text{eV}$ (der Standardwert war $\Phi_{Mg} = 3.635\text{eV}$) ist in Abb. 7.11 mittels der Strom-Spannungs-Kennlinie mit $|V_{GS}| = 10\text{V}$ für Mg als Drain (a) als auch für Mg als Source (b) demonstriert. Für Mg als Drain und kleine $|V_{DS}|$ bleibt der p -Kanal Transistorstrom unbeeinflusst. Der Einsatz des bei Drain injizierten Elektronenstroms wird mit abnehmender Austrittsarbeit (abnehmende Barriere für Elektronen) zu kleineren $|V_{DS}|$ verschoben. Gleichzeitig nimmt bei größeren $|V_{DS}|$ der Anstieg des injizierten Elektronenstromes zu. Vergleicht man die Anstiege der nahezu linearen Abhängigkeit z.B. für $\Phi_{Mg} = 3.63\text{eV}$ und 3.68eV , erhält man aus Abb. 7.11a ein Verhältnis von ≈ 6.9 . Das stimmt gut mit dem Verhältnis der Elektronenkonzentrationen am Kontakt für die beiden Werte der Austrittsarbeiten überein:

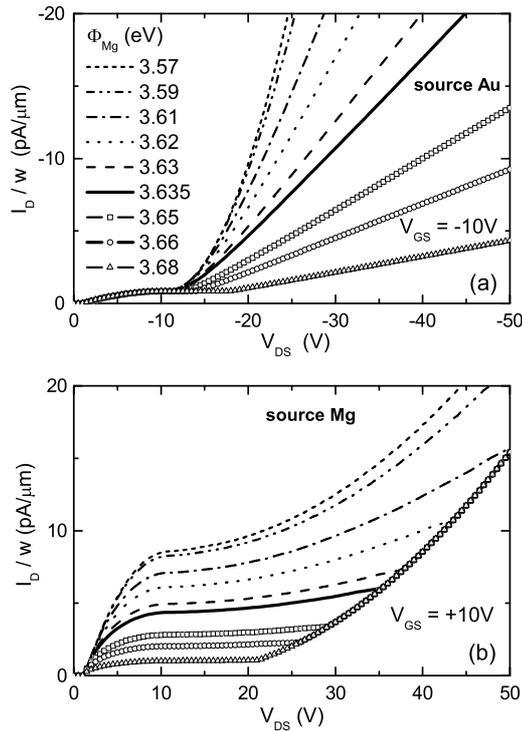


Abbildung 7.11: Simulierte Ausgangskennlinien für Source am Au-Kontakt (a) und Source am Mg-Kontakt (b) für $V_{GS} = \pm 10\text{V}$ mit einer Variation der Mg-Austrittsarbeit wie angegeben, sonst Standardparameter wie in Abb. 7.4.

$\exp[\Delta\Phi_{Mg}/kT] = \exp[0.05/0.0258] = 6.94$. Das zeigt, dass dieser Anstieg und infolgedessen dieser Strom im wesentlichen nur durch das kleine Gebiet der niedrigen Elektronenkonzentration am Mg-Kontakt (man vergleiche Abb. 7.8) bestimmt wird. Für Mg als Source (Abb. 7.11b) nimmt der n -Kanal Transistorstrom bei kleiner Drain-Source-Spannung stark mit abnehmender Elektronenbarriere (abnehmender Austrittsarbeit) zu. Das könnte man als Abhängigkeit der Beweglichkeit vom Kontaktmaterial missdeuten.

Variation der Beweglichkeiten

Der große Einfluß der gewählten Werte für die Beweglichkeiten wurde in den Abschnitten 7.3.1 und 7.3.2 diskutiert. Der Einfluß einer Variation beider Beweglichkeiten (Standardwerte waren $\mu_p = 1.2 \times 10^{-4}\text{cm}^2/\text{Vs}$ und $\mu_n = 1.2 \times 10^{-3}\text{cm}^2/\text{Vs}$) wird in Abb. 7.12 mittels der Strom-Spannungs-Kennlinie mit $|V_{GS}| = 10\text{V}$ für Au als Source (a) und für Mg als Source (b) gezeigt. Ein Vertauschen der beiden Beweglichkeitswerte führt zum Verschwinden des bei Mg-Drain injizierten Elektronenstromes (oder der Einsatz ist über den betrachteten Bereich der Drainspannung hinaus verschoben), der p -Kanal Strom für Au-Source ist größer und zeigt gute Sättigung. Für Source bei Mg ist hingegen der n -Kanal Strom reduziert und der Einsatz des bei Au-Drain injizierten Lochstromes ist zu kleineren $|V_{DS}|$ hin verschoben. Die weiteren Variationen in Abb. 7.12 bestätigen die folgenden Tendenzen: Der Einsatz des bei Drain injizierten Stromes wird für eine größere Beweglichkeit der entsprechenden Ladungsträger zu kleineren $|V_{DS}|$ verschoben, die Größe des linearen Anstiegs des bei Mg-Drain injizierten Elektronenstromes ist proportional zur Elektronenbeweglichkeit (im Bereich der niedrigen Elektronenkonzentration nahe Drain, welcher

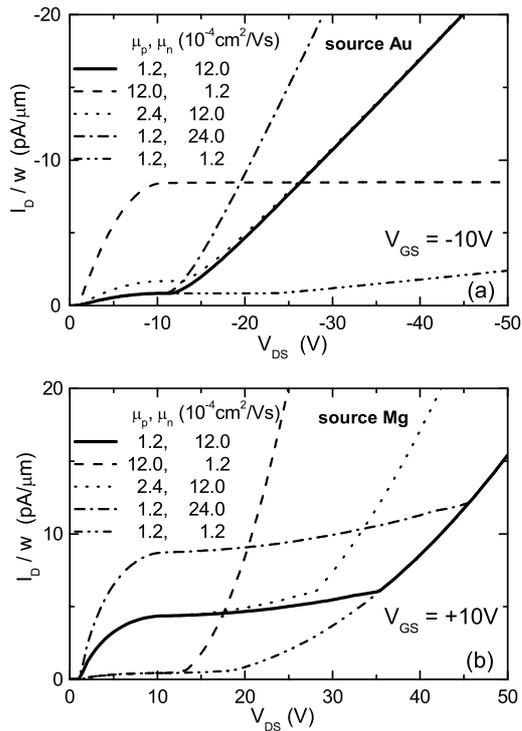


Abbildung 7.12: Simulierte Ausgangskennlinien für Source am Au-Kontakt (a) und Source am Mg-Kontakt (b) für $V_{GS} = \pm 10\text{V}$ mit einer Variation der Elektronen- und Löcherbeweglichkeiten wie angegeben, sonst Standardparameter wie in Abb. 7.4.

diesen Strom bestimmt), die Krümmung des bei Au-Drain injizierten SCLC-artigen Lochstromes nimmt mit der Beweglichkeit zu.

Generell erhält man für gegebene Injektionsbarrieren durch eine Variation der Beweglichkeiten eine große Vielfalt an Strom-Spannungs-Kennlinien (in Abb. 7.12 nur für eine Gate-Source-Spannung dargestellt). Selbst kleine Änderungen der Beweglichkeiten (z.B. durch chemische Modifizierung der organischen Schicht) können vorteilhaft sein, das ambipolare Verhalten zu verbessern.

Einfluß der Rekombination

Bisher wurde in den Simulationen direkte (Langevin) Rekombination entsprechend Gleichungen (3.17) und (3.18) berücksichtigt, in früheren Modellen wurde hingegen Rekombination vernachlässigt. Die Ausgangskennlinien in Abb. 7.13 für Au-Source (a) und Mg-Source (b) wurden ohne Berücksichtigung von Rekombination simuliert. Die entsprechenden Kennlinien mit Rekombination sind jene in Abbn. 7.4a und 7.5a. Für Au-Source ist ohne Rekombination der Lochstrom für kleine $|V_{DS}|$ nahezu unverändert, der Einsatz des bei Mg-Drain injizierten Elektronenstromes ist jedoch zu kleineren $|V_{DS}|$ verschoben. Für Source am Mg-Kontakt führt die Vernachlässigung der Rekombination zu qualitativ unterschiedlichen Ausgangskennlinien, es tritt ein zusätzlicher Buckel und keine deutliche Verschiebung des Lochstromes (injiziert bei Au-Drain) mit $|V_{GS}|$ auf. Das alles steht im Widerspruch zu den qualitativen Abhängigkeiten der Messungen (Abb. 7.2b). Folglich wird eine Beschreibung experimenteller Daten mit Modellen ohne Rekombination (falls möglich) zwangsläufig zu nicht relevanten Werten für die anderen Modellparameter führen.

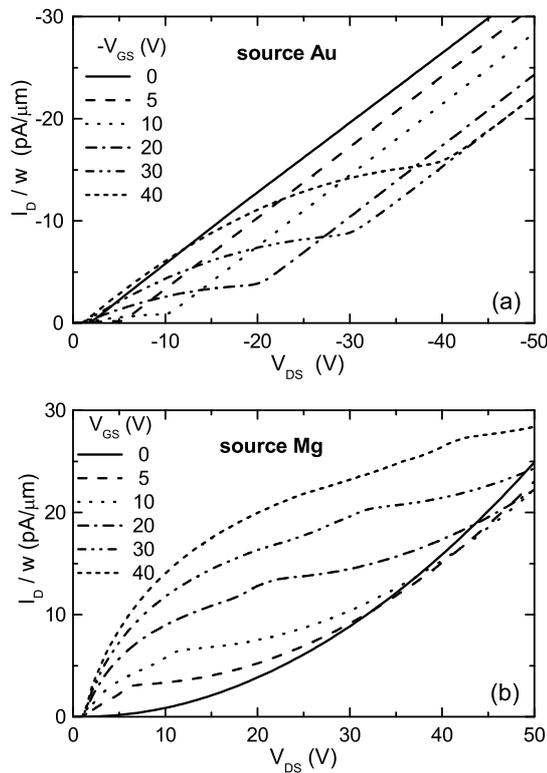


Abbildung 7.13: Simulierte Ausgangskennlinien für Source am Au-Kontakt (a) und Source am Mg-Kontakt (b). Standardparameter wie in Abb. 7.4 jedoch ohne Rekombination.

Einfluß einer Grenzflächenladung

Obwohl die Simulationen für das Einschicht-Modellsystem bereits die wesentlichen Eigenheiten, welche charakteristisch für das ambipolare Verhalten in Abb. 7.2 sind, liefern, gibt es einen auffallenden Unterschied zwischen diesen experimentellen Kennlinien und den Simulationen. Vergleicht man die Kennlinien mit Au als Source, ist deutlich sichtbar, dass der Einsatz des bei Mg-Drain injizierten Elektronenstromes im Experiment (Abb. 7.2a) bei viel größerer Drain-Source-Spannung auftritt als in den Simulationen (Abb. 7.4a). Eine solche Verschiebung kann durch eine Flächenladung an der Grenzfläche zwischen dem Gateisolator und der aktiven organischen Schicht verursacht werden (Schwellspannung im FET wird verschoben). Das wird mittels der simulierten Ausgangskennlinien in Abb. 7.14 gezeigt (durchgezogene Linien, die Symbole werden in Abschnitt 7.4 diskutiert). Neben den Standardparametern, welche in Abb. 7.4 verwendet wurden, wurde hier zusätzlich eine negative Grenzflächenladung $Q_{it} = -8 \times 10^{11} \text{e cm}^{-2}$ berücksichtigt. Im Vergleich mit Abb. 7.4a erhält man für Au-Source bei kleineren $|V_{DS}|$ einen erhöhten Lochstrom, eine Verschiebung des Einsatzes des bei Drain injizierten Elektronenstromes zu größeren $|V_{DS}|$ wie im Experiment und entsprechend für eine gegebene größere $|V_{DS}|$ einen niedrigeren Elektronenstrom. Das ist einfach darin begründet, dass diese negative Grenzflächenladung zusätzliche Löcher in den Kanal zieht und Elektronen zurückdrängt. Aus dem gleichen Grund ist für Mg-Source der Elektronenstrom bei kleineren V_{DS} im Vergleich zu Abb. 7.5a verringert, der Einsatz des bei Au-Drain injizierten Lochstromes ist zu kleineren V_{DS} verschoben und für eine gegebene größere

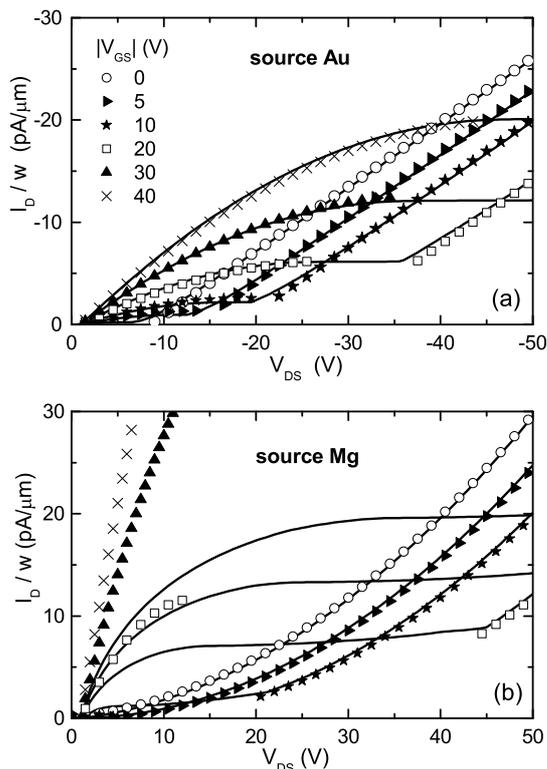


Abbildung 7.14: Simulierte Ausgangskennlinien für Source am Au-Kontakt (a) und Source am Mg-Kontakt (b) (wie in Abbn. 7.4a und 7.5a). Standardparameter wie in Abb. 7.4, zusätzlich wurde eine negative Grenzflächenladung $Q_{it} = -8 \times 10^{11} \text{e cm}^{-2}$ einbezogen. Durchgezogene Linien: Simulation; Symbole: stückweise analytische Modelle wie im Text beschrieben, Gleichungen (7.1), (7.2) und (7.3). Die Gate-Source-Spannungen sind in (a) negativ und in (b) positiv.

V_{DS} ist der Lochstrom erhöht.

Die große Verschiebung des Einsatzes des bei Drain injizierten Elektronenstromes in den Messungen für den Heterostruktur-Transistor (Abb. 7.2a) zeigt deutlich, dass in diesem Bauelement eine negative Grenzflächenladung vorhanden ist.

7.4 Direkte Parameterextraktion: Möglichkeiten und Einschränkungen

Zur direkten Extraktion von Materialparametern aus gemessenen Strom-Spannungskennlinien benötigt man einfache und trotzdem verlässliche analytische Modell. Extrahierte Parameter können ebenfalls als Eingabewerte in numerischen Simulationen verwendet werden. Zur Analyse der Messungen von OFETs nutzt man in den meisten Fällen das einfache Shockley-Modell.¹ Der Drainstrom des Transistors (oberhalb der Schwellspannung) ist dabei entsprechend Gleichung (2.1) gegeben. Für den ambipolaren FET hat man jedoch offensichtlich, zumindest den Ausdruck für den Sättigungsbereich durch einen anderen zu ersetzen, welcher den bei Drain injizierten Strom beschreibt.

Ein Vorteil numerischer Simulationen ist, dass sie verwendet werden können, um

¹In einigen Fällen scheint das a-Si-Modell mit einer exponentiellen Trapverteilung in der Bandlücke angemessen, Kapitel 4 ([E5]). Aber die Abhängigkeit der sogenannten Feldeffekt-Beweglichkeit von der Gatespannung, welche für dieses Modell und ebenfalls für das Vissenberg-Matters Modell [71] charakteristisch ist, wird in [121] nicht beobachtet.

die Zuverlässigkeit von Modellen zu prüfen, da die Materialparameter als Eingabedaten bekannt sind. Das wird hier anhand der simulierten Ausgangskennlinien für den Fall mit zusätzlicher Grenzflächenladung (Abb. 7.14) getan. Für die hier betrachtete dünne Schicht gilt nach Gleichung (2.3) $V_{th} \approx V_{FB}$ und mit den Parametern aus Abschnitt 7.2.2 $V_{FB} = 0.065V$ (Gleichung (2.4), ohne Grenzflächenladung), was vernachlässigt wird. Aufgrund der unterschiedlichen Austrittsarbeiten von Source und Drain muß V_{DS} durch $V_{DS} - V_{bi}$ ersetzt werden, wobei für das built-in Potential $V_{bi} = (\Phi_{Mg} - \Phi_{Au})/e$ gilt. Die Grenzflächenladung ist mit einer effektiven Verschiebung der Gate-Source-Spannung entsprechend $Q_{it}'' = C_{ox}'' \Delta V_{GS}$ verbunden. Damit wird für Au-Source die erste der Gleichungen (2.1) für den aktiven Bereich des p -Kanals (kleine $|V_{DS}|$) durch

$$\frac{I_D}{w} = -\mu_p \frac{C_{ox}''}{L} \left[(V_{DS} - V_{bi})(V_{GS} + \gamma^{-1} \Delta V_{GS}) - \frac{1}{2}(V_{DS} - V_{bi})^2 \right] \quad (7.1)$$

ersetzt. Es mußte zusätzlich der phänomenologische Parameter γ eingeführt werden. Anstatt des Sättigungsstromes entsprechend der zweiten Gleichung von (2.1) tritt der bei Mg-Drain injizierte Elektronenstrom auf. Dessen lineare Abhängigkeit von V_{DS} und die parallele Verschiebung mit V_{GS} und ΔV_{GS} können mit

$$\frac{I_D}{w} = \frac{G_n}{w} [(V_{DS} - V_{bi}) - (\gamma V_{GS} + \Delta V_{GS})] \quad (7.2)$$

beschrieben werden. Mit den Ausdrücken (7.1) und (7.2) kann eine gute stückweise Beschreibung der Ausgangskennlinien erreicht werden, wie in Abb. 7.14a gezeigt. Das built-in Potential wurde mit $V_{bi} = -1.0V$ aus den simulierten Strom-Spannungskennlinien abgeschätzt (wo der Strom verschwindet). Dieser Wert ist etwas geringer als der Eingabewert $V_{bi} = -1.365V$ entsprechend den verwendeten Austrittsarbeiten. Die Differenz wird möglicherweise durch den geringen Potentialabfall am Au-Anreicherungskontakt verursacht. Der phänomenologische Parameter $\gamma = 0.952$ weicht nur geringfügig vom Idealwert $\gamma = 1$ ab. Die weiteren angepaßten Parameter sind: $\mu_p = (1.08...1.19) \times 10^{-4} \text{cm}^2/\text{Vs}$ (mit der Gatespannung zunehmend), $\Delta V_{GS} = -7.57V$ und der Leitwert $G_n/w = 6.3 \times 10^{-9} \text{S/cm}$. Die extrahierte Lochbeweglichkeit reproduziert sehr gut den Eingabewert von $\mu_p = 1.2 \times 10^{-4} \text{cm}^2/\text{Vs}$. Aus ΔV_{GS} erhält man für die Grenzflächenladung $Q_{it}'' = -10.9 \times 10^{11} \text{e cm}^{-2}$, das liegt nur etwas oberhalb des Eingabewertes von $Q_{it}'' = -8 \times 10^{11} \text{e cm}^{-2}$. Es verbleibt noch der n -Kanal Leitwert. Dieser Strom wird nach der Analyse in Abschnitt 7.3.2 durch den Widerstand der Verarmungsschicht zwischen n -Kanal und Mg-Drain limitiert. Er sollte daher durch $G_n/w = \sigma d_{org}/l_{dep} = e\mu_n n_{depl} d_{org}/l_{dep}$ beschrieben werden, hier ist n_{depl} die Elektronenkonzentration in der Verarmungsschicht und l_{dep} deren Länge. Zusammen mit der Elektronenbeweglichkeit sind das drei unbekannt Parameter, welche nicht aus dem einen extrahierten Leitwert bestimmt werden können. Man kann jedoch überprüfen, ob die Schlußfolgerung, dass die kleine Verarmungszone den gesamten Elektronenstrom bestimmt, zutreffend ist: Schätzt man $n_{depl} \approx 10^{14} \text{cm}^{-3}$ und $l_{dep} \approx 100 \text{nm}$ aus den simulierten Profilen (Abb. 7.8) ab und verwendet die eingegebene Elektronenbeweglichkeit von $\mu_n = 1.2 \times 10^{-3} \text{cm}^2/\text{Vs}$, erhält man $G_n/w \approx 5.8 \times 10^{-9} \text{S/cm}$. Das stimmt gut mit dem aus der Strom-Spannungskennlinie extrahierten Wert überein, was die Erklärung für die lineare Abhängigkeit dieses Stromes von V_{DS} bestätigt.

Als nächstes wird der Fall Mg-Source betrachtet mit den n -Kanal Transistor-kennlinien für kleinere V_{DS} und dem bei Au-Drain injizierten Lochstrom bei größeren V_{DS} mit dessen quadratischer Abhängigkeit von V_{DS} und seiner Verschiebung mit V_{GS} (Abb. 7.14b). Die Anwendbarkeit der modifizierten Shockley-Gleichung (7.1) für den Elektronen-Transistorstrom muß als höchst fragwürdig angesehen werden, da man zur Herleitung der Shockley-Gleichung zumindest den Source-Kontakt als ohmschen Kontakt voraussetzt, hier hingegen ist Mg-Source eindeutig nicht ohmsch. Ersetzt man in Gleichung (7.1) $V_{DS} \rightarrow -V_{DS}$, $V_{GS} \rightarrow -V_{GS}$, $V_{bi} \rightarrow -V_{bi}$ und $\mu_p \rightarrow \mu_n = 1.2 \times 10^{-3} \text{cm}^2/\text{Vs}$, erhält man tatsächlich viel größere Ströme als die simulierten (Symbole in Abb. 7.14b für $V_{GS} = 20, 30, 40\text{V}$). Des weiteren liefert Gleichung (7.1) für den Übergang in die Sättigung eine quadratische Abhängigkeit von der Gatespannung, die Simulationen zeigen hingegen eine nahezu lineare Abhängigkeit. Eine Beschreibung der simulierten Strom-Spannungs-Kennlinien könnte mit dieser Gleichung dennoch möglich sein, wenn man eine kleinere und gatespannungsabhängige effektive Beweglichkeit $\mu_{n,\text{eff}}(V_{GS})$ einführt. Auf diese Weise erhält man jedoch eine scheinbare Abhängigkeit der Beweglichkeit vom Kontakt, was im Widerspruch zur Tatsache einer unverändert höheren Beweglichkeit und einer gatespannungsabhängigen Reduzierung des Stromes aufgrund des Schottky-Kontaktes zum n -Kanal bei Source ist.

Für Source am Mg-Kontakt beschreibt der Ausdruck

$$\frac{I_D}{w} = K [V_{DS} - V_0 - V_{GS}]^2 \quad (7.3)$$

den bei Au-Drain injizierten Lochstrom für größere V_{DS} gut, sowohl die quadratische Spannungsabhängigkeit als auch die Verschiebung mit V_{GS} , wie in Abb. 7.14b zu sehen. Die Konstante $V_0 = -4\text{V}$ steht hier jedoch nicht direkt mit Q''_{it} in Zusammenhang wie die entsprechende Konstante ($V_{bi} + \Delta V_{GS}$) in Gleichung (7.2). Der Grund wurde bereits genannt: Aufgrund der großen Elektronenbeweglichkeit dominiert der bei Drain induzierte p -Kanal erst bei größeren Drain-Source-Spannungen, wenn der n -Kanal bereits nahezu verschwunden ist. Die andere Konstante beträgt $K = 1.02 \times 10^{-14} \text{AV}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$. Löcherinjektion am Au-Drainkontakt mit seinem Überschuß an Löchern und die quadratische Spannungsabhängigkeit deuten SCLC (raumladungsbegrenzten Strom) an. Die Konstante in Gleichung (7.3) ist dann durch den bekannten Ausdruck

$$K = \left(\frac{9\pi}{8}\right)^{1/2} \varepsilon \varepsilon_0 \left(\frac{2e\mu_n\mu_p(\mu_n + \mu_p)}{\varepsilon \varepsilon_0 r_L}\right)^{1/2} \frac{d_{\text{org}}}{L^3} = \left(\frac{9\pi}{8}\right)^{1/2} \varepsilon \varepsilon_0 (2\mu_n\mu_p)^{1/2} \frac{d_{\text{org}}}{L^3} \quad (7.4)$$

gegeben. Im zweiten Ausdruck wurde die Konstante (3.18) eingesetzt. Vom angepaßten Wert K könnte man also den geometrischen Mittelwert der Beweglichkeiten bestimmen. Man erhält $(\mu_n\mu_p)^{1/2} = 113 \text{cm}^2/\text{Vs}$, aus den Eingabewerten ergibt sich hingegen $(\mu_n\mu_p)^{1/2} = 3.8 \times 10^{-4} \text{cm}^2/\text{Vs}$, mehr als fünf Größenordnungen niedriger. Um die Abweichung aufzuklären, wurde die Kennlinie einer Diode simuliert, welche eine ähnliche Struktur wie der Transistor (Abb. 7.3) hat, allerdings ohne Gateoxid und Gateelektrode. In diesem Fall beschreibt Gleichung (7.3) (mit $V_{GS} = 0$ und $V_0 = V_{bi}$) den simulierten Strom mit $K = 3.12 \times 10^{-20} \text{AV}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$. Aus K erhält man dann mit Gleichung (7.4) $(\mu_n\mu_p)^{1/2} = 3.5 \times 10^{-4} \text{cm}^2/\text{Vs}$ in guter Übereinstimmung mit den Eingabewerten der Beweglichkeiten. Gleichungen (7.3) und (7.4)

sind analytische Näherungen, die die ein-dimensionale Lösung der Poisson-Gleichung beinhalten. Daher sind sie für die Diode angemessen. Im FET ist dagegen aufgrund der angelegten Gatespannung das senkrechte Feld viel größer als das Feld längs des Kanals (etwa $\approx L/d_{\text{ox}}$, in dieser Struktur $\approx 10^5$). Es erzeugt eine extrem schmale Anreicherungsschicht und die Überschlußladungen der Löcherinjektion bei Au-Drain sind ebenfalls in diesem schmalen Gebiet eingeeengt. Für diesen zwei-dimensionalen Fall gibt es keine analytische Näherung und die numerische Lösung erhält man gerade mit der Simulation. Man lernt also, dass Raumladungsbegrenzung in einer Anreicherungsschicht zu Strömen führt, die um Größenordnungen größer sind als in einer Diode, die quadratische Spannungsabhängigkeit bleibt überraschenderweise erhalten.

7.5 Zusammenfassung

Numerische zwei-dimensionale Simulationen für ein Einschicht-Modellsystem (Abbildung 7.3) lieferten Strom-Spannungs-Kennlinien mit den gleichen Eigenheiten des ambipolaren Verhaltens, wie es experimentell in einer Zweischicht-Struktur mit einem elektroneninjizierenden top-Kontakt (Abb. 7.1b) beobachtet wurde: Für Au-Source und negative Gatespannung erhält man für kleinere negative Drain-Source-Spannungen typische p -Kanal Kennlinien mit einem abrupten steilen Anstieg des Drainstromes ab einer bestimmten Drainspannung, verursacht durch Elektroneninjektion an Mg-Drain. Mit zunehmender negativer Gatespannung verschiebt sich der Einsatz dieses Stromes zu einer größeren negativen Drainspannung und der Strom zeigt eine nahezu lineare Abhängigkeit von der Drainspannung. Für Mg-Source und positive Gatespannung tritt neben der Ausbildung des n -Kanals bei kleinen Drain-Source-Spannungen wiederum ein zusätzlicher Strom für eine größere Drain-Source-Spannung auf, verursacht durch Löcherinjektion an Au-Drain. Der n -Kanal Strom nimmt in Sättigung nahezu linear mit der Gate-Source-Spannung zu, im Gegensatz zur üblichen quadratischen Abhängigkeit. Der bei Au-Drain injizierte Lochstrom verläuft quadratisch mit der Drainspannung und beginnt, erst ab einen gewissen Spannungsbereich oberhalb des Übergangs des Elektronenstromes in die Sättigung zu dominieren. Im Gegensatz dazu dominiert im Fall von Au-Source der zusätzliche Elektronenstrom bereits etwa ab dem Übergang des Lochstromes in die Sättigung. Folglich können beide Einsätze nicht durch die gleiche Schwellspannung beschrieben werden.

Ein Verständnis der Eigenschaften kann von den Einzelheiten der inneren Profile des Potentials und der beiden Ladungsträgerkonzentrationen erhalten werden. Die gewöhnlichen p -Kanal Kennlinien für Au-Source und die quadratische Abhängigkeit des bei Au-Drain injizierten Lochstromes für größere Drainspannungen sind mit der Lochanreicherung an diesem Kontakt verbunden. Da die Elektronendichte am Mg-Kontakt viel geringer ist als im n -Kanal, tritt dort eine Verarmungszone zwischen dem Kontakt und dem Kanal auf. Dies führt für Mg-Source zu geringeren Strömen, als von der Beweglichkeit her erwartet, zu der nicht quadratischen Abhängigkeit von der Gatespannung und für den Fall von Mg-Drain bei größeren Spannungen zur linearen Abhängigkeit von der Drainspannung. Aufgrund der größeren Elektronenbeweglichkeit beginnt der bei Mg-Drain injizierte Strom praktisch ab der

Drainspannung zu dominieren, bei welcher der n -Kanal ausgebildet wird. Der bei Au-Drain injizierte Lochstrom hingegen wird in den Strom-Spannungs-Kennlinien erst bei größeren Spannungen sichtbar. Wenn bei größeren Drainspannungen beide Kanäle existieren, tritt Rekombination an der Position mit $n = p$ auf, wobei sich diese Zone mit zunehmender Drainspannung von Drain nach Source verschiebt. Für Mg-Drain verläuft diese Verschiebung schneller, da die dort injizierten Elektronen die größere Beweglichkeit besitzen. Aus dem gleichen Grund ist die Rekombination in beiden Fällen am Au-Kontakt größer. In der betrachteten 30nm dicken Schicht fallen die Konzentrationen in beiden Kanälen etwa zwei Größenordnungen in Richtung der äußeren Grenzfläche ab, sind dort aber immer noch größer als $n = p$ und folglich ist die Rekombination nahezu über der gesamten Schicht konstant.

Variationen verschiedener Parameter bestätigen die angegebene Interpretation der Arbeitsweise dieses Bauelementes. Für ein ausgeprägtes ambipolares Verhalten ist eine geeignete Kombination des Beweglichkeitsverhältnisses und der Barriere des elektroneninjizierenden Kontaktes von Bedeutung.

Die direkte Parameterextraktion ist auf die Beweglichkeit der Löcher von den p -Kanal Kennlinien mit Au-Source beschränkt, da an diesem Kontakt Anreicherung vorliegt und auf die Grenzflächenladung, welche zu einer Flachbandverschiebung verbunden mit einer Verschiebung des Einsatzes des bei Drain injizierten Elektronenstromes führt. Es gibt zu viele Parameter, die die Verarmungszone nahe Mg bestimmen, um diese aus den Strom-Spannungs-Kennlinien ermitteln zu können. Obwohl der bei Au-Drain injizierte Lochstrom mit einer quadratischen Abhängigkeit von der Drainspannung raumladungsbegrenzt ist, weicht sein Wert aufgrund der Einschränkung durch das senkrechte Feld, welches sehr viel stärker als das Feld in Stromrichtung ist, extrem vom Standardausdruck für SCLC ab.

Kapitel 8

Ambipolarer organischer Heterostruktur - Feldeffekt - Transistor

Nachdem im vorigen Kapitel ein Grundverständnis der prinzipiellen Arbeitsweise eines double-injection OFETs anhand eines einfacheren Einschicht-Modellsystems erarbeitet wurde, behandelt dieses Kapitel den organischen Heterostruktur-TFT. Dabei wird schrittweise vorgegangen, um die Auswirkungen der veränderten Bauelementstruktur auf die Kennlinien zu verdeutlichen. Erst anschließend wird versucht, die gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinien des Heterostruktur-OFET aus Ref. [121] zu simulieren. Bisherige Erfolge als auch verbleibende Probleme bei der Beschreibung der Kennlinien werden diskutiert.

8.1 Transistorstruktur und Materialparameter

Der Querschnitt der simulierten Bauelementstruktur ist in Abb. 8.1 dargestellt.

Die Abmessungen entsprechen dabei im wesentlichen der präparierten Transistorstruktur in Ref. [121] (siehe Abb. 7.1b). Die Kanallänge beträgt $L = 140\mu\text{m}$, die Kanalweite in der Simulation generell $w = 1\mu\text{m}$. Zum Vergleich mit den experimentellen Kennlinien wird der Strom mit dem Faktor 2000 multipliziert, entsprechend der experimentellen Kanalweite von $2000\mu\text{m}$. Wie im Experiment ist der Au-Kontakt 40nm dick, in der Simulation wurde eine Abschrägung mit einem Winkel von 45° eingeführt. Die laterale Ausdehnung des Source- und Drainkontaktes ist in der Simulation auf jeweils $10\mu\text{m}$ begrenzt worden, die Kennlinien bleiben davon unbeeinflusst. Die Kontakte sind durch die Austrittsarbeit des Kontaktmaterials charak-

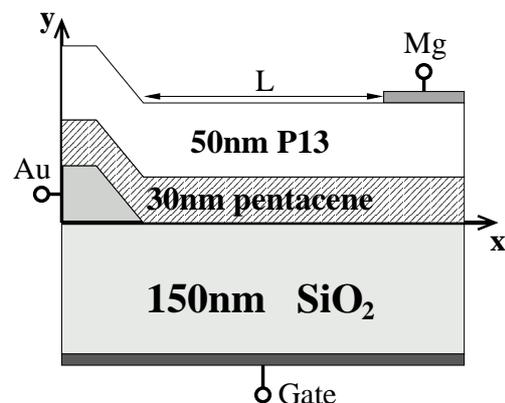


Abbildung 8.1: Simulierte Struktur des organischen Heterostruktur-TFT

terisiert. Für das Gate wird ein Wert von 4.08eV ($n^+ - Si$ mit $N_D = 8 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$) verwendet, für den Au-Kontakt ein Wert von 5.0eV, Mg-Kontakt siehe unten. Die SiO_2 Isolatorschichtdicke beträgt $d_{\text{ox}} = 150 \text{nm}$ mit einer relativen dielektrischen Konstante von $\varepsilon_{\text{ox}} = 3.9$. Die beiden aktiven organischen Schichten sind 30 nm bzw. 50 nm dick und werden als intrinsisch angenommen. Für die erste Schicht wurde im Experiment Pentacen, für die zweite PTCDI- $\text{C}_{13}\text{H}_{27}$ (P13) verwendet. Für Pentacen werden die Parameter wie in Kapitel 7 verwendet [127]: relative dielektrische Konstante $\varepsilon^{\text{Pentacen}} = 3.5$, Elektronenaffinität $\chi^{\text{Pentacen}} = 3.22 \text{eV}$, Bandlücke $E_g^{\text{Pentacen}} = 1.85 \text{eV}$, effektive Zustandsdichte $N_C^{\text{Pentacen}} = N_V^{\text{Pentacen}} = 10^{21} \text{cm}^{-3}$ (Monomerdichte). Der P13-Schicht wurden die folgenden Parameter zugewiesen (Werte von PTCDI- CH_3 [129]): relative dielektrische Konstante $\varepsilon^{\text{P13}} = 3.5$, Elektronenaffinität $\chi^{\text{P13}} = 3.4 \text{eV}$, Bandlücke $E_g^{\text{P13}} = 2.0 \text{eV}$, effektive Zustandsdichte $N_C^{\text{P13}} = N_V^{\text{P13}} = 10^{21} \text{cm}^{-3}$ (Monomerdichte). Zunächst wird angenommen, dass in beiden Materialien gleiche Ladungsträgerbeweglichkeiten vorliegen, dabei werden die Standardwerte aus Kapitel 7 verwendet: $\mu_n = 1.2 \times 10^{-3} \text{cm}^2/\text{Vs}$ und $\mu_p = 1.2 \times 10^{-4} \text{cm}^2/\text{Vs}$. Direkte Rekombination wird ebenfalls berücksichtigt. Alle Ergebnisse entsprechen einer Temperatur von 300K.

8.2 Auswirkung der Transistorstruktur

Dass die Struktur eines Transistors dessen Kennlinien beeinflusst, ist bereits in Kapitel 4 gezeigt worden, wo die BOC- und die TOC-Struktur miteinander verglichen wurde. Beim Übergang von der Struktur in Abb. 7.3 zur Heterostruktur nach Abb. 8.1 wechselt man insbesondere auch von einem bottom Mg-Kontakt zu einem top Mg-Kontakt. Es ist sinnvoll, zunächst den sich daraus ergebenden Einfluß auf die Kennlinien zu verdeutlichen. Dazu wird in der Transistorstruktur Abb. 8.1 die P13-Schicht durch Pentacen ersetzt, so dass also effektiv nur eine aktive Schicht der Dicke 80 nm vorliegt. Die entsprechenden Kennlinien sind in Abb. 8.2 dargestellt. Dabei wurden die genannten Standardparameter verwendet und eine Austrittsarbeit des Mg-Kontaktmaterials von 3.635eV, d.h. eine Elektronenbarriere von 0.415eV. Damit ist ein direkter Vergleich mit den Kennlinien des Einschicht-Modellsystems aus Kapitel 7 (Abb. 7.3) möglich, diese sind zum Vergleich ebenfalls in der Abbildung dargestellt (vergleiche Abbn. 7.4a und 7.5a). Abb. 8.2a stellt die Ausgangskennlinien für Au-Source und Abb. 8.2b die Ausgangskennlinien für den Fall dar, dass der Sourcekontakt bei Mg ist. In beiden Fällen beobachtet man einen wesentlich größeren Elektronenstrom, was auf die unterschiedliche Lage des Mg-Kontaktes zurückzuführen ist. Als bottom Kontakt grenzt dieser direkt an den Kanal und wirkt dort als in Sperrichtung gepolter Schottky-Kontakt (für Elektronen), da die Elektronenkonzentration am Kontakt kleiner ist als die Konzentration im ausgebildeten n-Kanal. Im Fall des top-Kontaktes liegt hingegen direkt am Kontakt eine Anreicherung an Elektronen bezüglich des intrinsischen Materials vor. (Man vergleiche dazu auch die Diskussionen in Kapitel 4 und 7.) Daher ergibt sich für Au-Source ein größerer Elektronen-Injektionsstrom und ein größerer Elektronen-Transistorstrom für Mg-Source. Unverändert bleibt hingegen der Loch-Transistorstrom als auch der Loch-Injektionsstrom für Mg-Source bei $V_{\text{GS}} = 0 \text{V}$. Die veränderte Schichtdicke beeinflusst die Ausgangskennlinien nicht. Aufgrund des intrinsischen Materials ist die

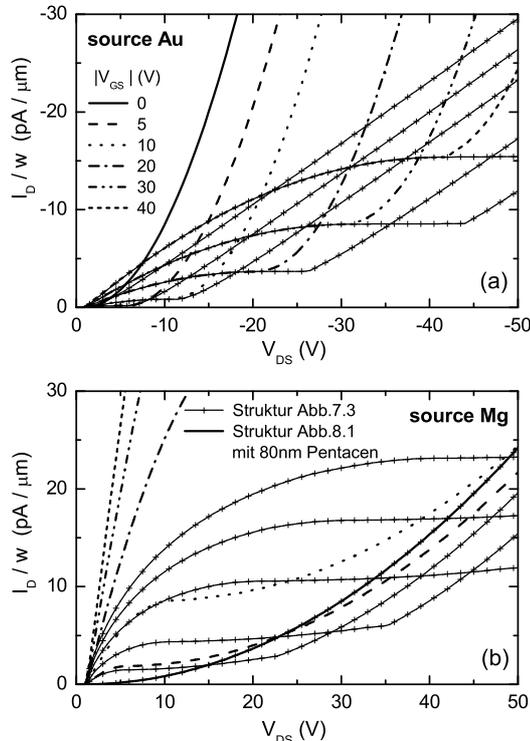


Abbildung 8.2: Simulierte Ausgangskennlinien für Source am Au-Kontakt (a) und Source am Mg-Kontakt (b) an einer Struktur mit nur einer aktiven Schicht (Pentacen) der Dicke 80 nm anstatt zweier aktiver Schichten gleicher Gesamtschichtdicke. Die angegebenen Gate-Source-Spannungen sind in (a) negativ und in (b) positiv. Standardparameter: Au-Austrittsarbeit 5.0 eV (Barriere für Löcher 0.07 eV), Mg-Austrittsarbeit 3.635 eV (Barriere für Elektronen 0.415 eV), $\mu_p = 1.2 \times 10^{-4} \text{cm}^2/\text{Vs}$, $\mu_n = 1.2 \times 10^{-3} \text{cm}^2/\text{Vs}$, direkte Langevin Rekombination, undotierte organische Schicht. Der Drainstrom ist pro Einheit der Kanalweite angegeben. Zum Vergleich sind zusätzlich die Kennlinien für die Einschicht-BOC-Struktur (Modellsystem aus Kapitel 7) gezeigt, siehe Abb. 7.4a und 7.5a.

Verarmungslänge groß genug, dass auch eine vollständige Verarmung der dickeren Schicht gewährleistet ist.

Anhand von Abb. 8.3 wird der Einfluß des Heteroübergangs zwischen den zwei unterschiedlichen aktiven Schichten in der Struktur entsprechend Abb. 8.1 gezeigt. Dabei gelten die getroffenen Aussagen zunächst für den Fall, dass die Ladungsträgerbeweglichkeiten beider Materialien vergleichbare Werte besitzen. Weiter unten wird auf den Fall eingegangen, wenn die zweite Schicht (P13) wesentlich größere Beweglichkeiten aufweist. Es sind wieder die Standard-Materialparameter verwendet worden. Zusätzlich wurde die Barriere für die Elektronen am Mg-Kontakt konstant gehalten, also 0.415 eV. Das heißt die Austrittsarbeit des Mg-Kontaktmaterials beträgt jetzt 3.815 eV, da die P13-Schicht und nicht Pentacen kontaktiert wird. Zum direkten Vergleich sind wiederum zusätzlich die entsprechenden Kennlinien aus Abb. 8.2 gezeigt. Der Einfluß der zweiten aktiven Schicht ist demnach vernachlässigbar, sowohl für den Fall Au-Source (Abb. 8.3a) als auch für den Fall mit Mg als Sourcekontakt (Abb. 8.3b). Hält man hingegen die Austrittsarbeit des Mg-Kontaktmaterials mit 3.635 eV fest, ergibt sich bei der Kontaktierung der P13-Schicht eine kleinere Injektionsbarriere für die Elektronen von 0.235 eV anstatt einer Barriere von 0.415 eV. Das würde dann entsprechend zu einem etwas größeren Elektronenstrom führen.

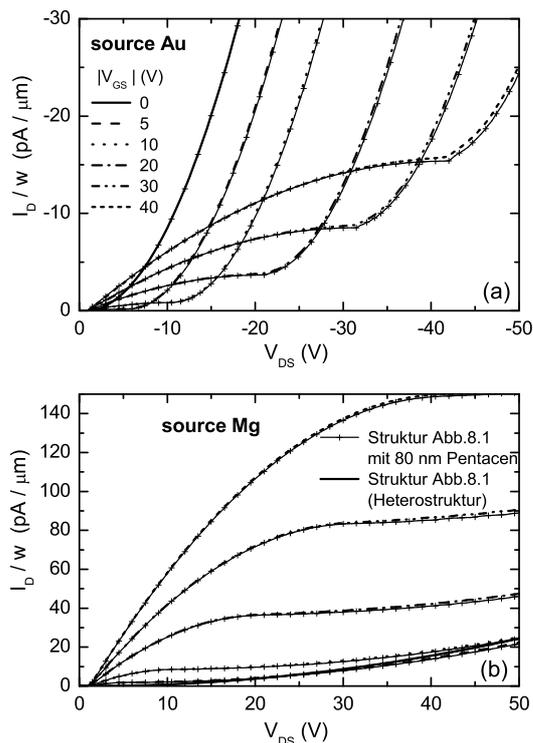


Abbildung 8.3: Simulierte Ausgangskennlinien für Source am Au-Kontakt (a) und Source am Mg-Kontakt (b) im Fall der Heterostruktur in Abb. 8.1. Die angegebenen Gate-Source-Spannungen sind in (a) negativ und in (b) positiv. Standardparameter: Au-Austrittsarbeit 5.0 eV (Barriere für Löcher 0.07 eV), $\mu_p = 1.2 \times 10^{-4} \text{cm}^2/\text{Vs}$, $\mu_n = 1.2 \times 10^{-3} \text{cm}^2/\text{Vs}$, direkte Langevin Rekombination, undotierte organische Schichten. Die Beweglichkeiten sind in beiden Materialien gleich gewählt. Die Barriere für Elektronen wurde beibehalten: 0.415 eV, d.h. Mg-Austrittsarbeit 3.815 eV. Zum Vergleich sind zusätzlich die Kennlinien aus Abb. 8.2 gezeigt.

Die Konzentrationen der Elektronen und der Löcher sind in Abb. 8.4 für die Strom-Spannungs-Kennlinie mit $V_{GS} = -10\text{V}$ aus Abb. 8.3a und in Abb. 8.5 für die Strom-Spannungs-Kennlinie mit $V_{GS} = +10\text{V}$ aus Abb. 8.3b gezeigt, jeweils für eine Variation der Drainspannung V_{DS} . Es sind Profile parallel zur x-Achse gezeigt (siehe Abb. 8.1), einmal 1nm oberhalb der Oxid/Pentacen- Grenzfläche ($y = 1\text{nm}$, ohne Symbol) und zusätzlich 1nm oberhalb der Pentacen/P13- Grenzfläche ($y = 31\text{nm}$, mit Symbol). Für Au-Source (negative V_{GS} , Abb. 8.4) dominiert bei kleinen Drainspannungen zunächst der Löcherkanal, mit zunehmender Drainspannung erscheint dann der Elektronenkanal und verdrängt zunehmend die Löcher. Entsprechend dominiert für Mg-Source (positive V_{GS} , Abb. 8.5) bei kleinen Drainspannungen zunächst der Elektronenkanal, welcher mit zunehmender Drainspannung zunehmend durch Löcher, injiziert von Au-Drain, verdrängt wird. Der Kanal injizierter Löcher dehnt sich dabei aufgrund der geringeren Lochbeweglichkeit wesentlich langsamer aus als der Kanal injizierter Elektronen. Dieses Verhalten ist bereits von der Einschichtstruktur bekannt. In der Heterostruktur verhalten sich zudem die Dichten an beiden Grenzflächen mit variabler Drainspannung analog, allerdings unterscheiden sich ihre Konzentrationen deutlich voneinander. Die (maximale) Elektronenkonzentration an der Pentacen/P13- Grenzfläche ist um einen Faktor 30 niedriger als an der Grenzfläche zum Gateoxid, sowohl im Fall von Au-Source als auch für Mg-Source. Die entsprechenden Löcherkonzentrationen unterscheiden sich um einen Faktor von etwa 10^7 . Die (maximale) Lochkonzentration an der Pentacen/P13- Grenzfläche beträgt also etwa $2 \times 10^{11} \text{cm}^{-3}$ und ist in Abb. 8.4b und Abb. 8.5b aufgrund der Skalierung nicht sichtbar. Die angegebenen Faktoren gelten für $|V_{GS}| = 10\text{V}$, sie nehmen mit steigender Gatespannung noch deutlich zu. An welcher Grenzfläche sich der

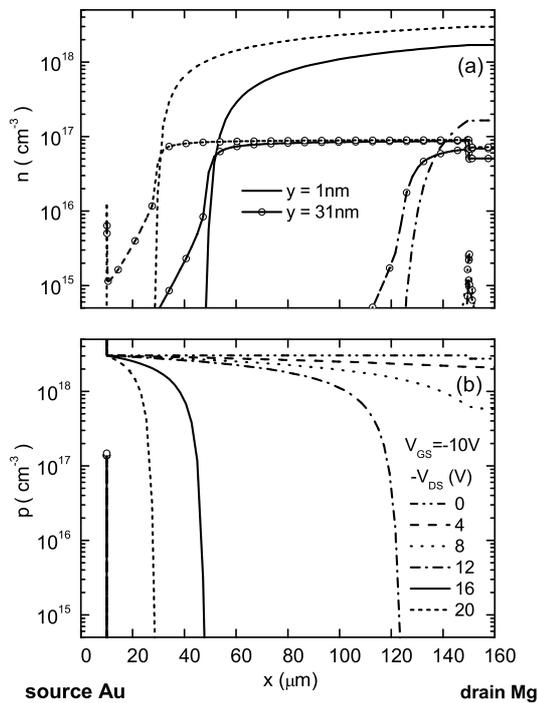


Abbildung 8.4: Profile der Elektronenkonzentration (a) und der Lochkonzentration (b) von Au-Source nach Mg-Drain für die $V_{GS} = -10\text{V}$ Strom-Spannungskennlinie in Abb. 8.3a. Linien bezeichnen Profile 1nm oberhalb der Oxid/Pentacen- Grenzfläche ($y = 1\text{nm}$) und die Linien mit Symbol Profile 1nm oberhalb der Pentacen/P13- Grenzfläche ($y = 31\text{nm}$), jeweils für eine Variation von $-V_{DS} = 0(4)20\text{V}$.

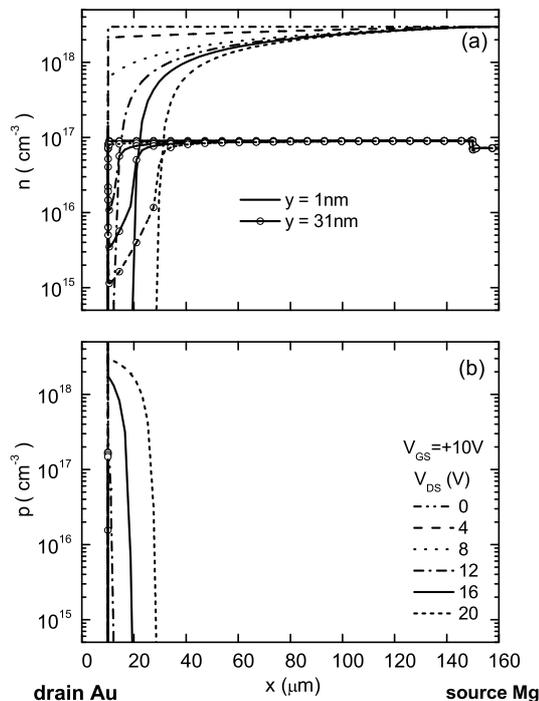


Abbildung 8.5: Profile der Elektronenkonzentration (a) und der Lochkonzentration (b) von Au-Drain nach Mg-Source für die $V_{GS} = +10\text{V}$ Strom-Spannungskennlinie in Abb. 8.3b. Linien bezeichnen Profile 1nm oberhalb der Oxid/Pentacen- Grenzfläche ($y = 1\text{nm}$) und die Linien mit Symbol Profile 1nm oberhalb der Pentacen/P13- Grenzfläche ($y = 31\text{nm}$), jeweils für eine Variation von $V_{DS} = 0(4)20\text{V}$.

stromführende Elektronenkanal ausbildet, hängt neben der Ladungsträgerkonzentration auch noch von den Beweglichkeiten ab. Sind die Elektronenbeweglichkeiten beider Materialien vergleichbar, so wird der Kanal an der Oxidgrenzfläche liegen, denn dort ist die Ladungsträgerkonzentration stets größer. Für den Fall, dass die Elektronenbeweglichkeit in Pentacen jedoch sehr viel geringer ist als in P13 und dieser Unterschied den Konzentrationsunterschied mehr als kompensiert, fließt der Elektronenstrom an der Pentacen/P13- Grenzfläche. Der stromführende Lochkanal liegt an der Oxidgrenzfläche. Zum einen unterscheiden sich die Lochkonzentrationen an den beiden Grenzflächen noch stärker als die Elektronenkonzentrationen und andererseits existiert an der Pentacen/P13- Grenzfläche keine Barriere für die Löcher.

8.3 Vergleich mit Experiment

Nach der bisherigen allgemeineren Betrachtung der Heterostruktur soll nun konkret versucht werden, die experimentellen Kennlinien aus Ref. [121] zu simulieren. Dazu sollen hier erste Simulationsergebnisse vorgestellt werden. Zur Anpassung der Kennlinien können mehrere Parameter variiert werden, dazu gehören die beiden Austrittsarbeiten der Kontaktmaterialien für Source und Drain, die Elektronen- und Löcherbeweglichkeiten in beiden aktiven Schichten (also vier Beweglichkeiten) und eine vorhandene Ladung an der Grenzfläche zum Gateoxid. Als weiterer Parameter wurde ein möglicher Serienwiderstand R eingeführt. Dieser könnte insbesondere als Kontaktwiderstand am Mg-Kontakt auftreten, da das Kontaktmaterial auf die organische Schicht aufgedampft wird und das Metall dabei möglicherweise weit in das Material eindringt. Diese Vielzahl der Parameter erschwert es, die bestmögliche Anpassung der Simulation an experimentelle Kennlinien zu finden. Für einen Parametersatz sind die Ausgangskennlinien in Abb. 8.6 dargestellt, die gewählten Werte sind in der Bildunterschrift angegeben. Mit den Austrittsarbeiten $\Phi_{\text{Au}} = 5.0\text{eV}$ und $\Phi_{\text{Mg}} = 3.66\text{eV}$ wurden hier die tatsächlichen Werte für Gold und Magnesium verwendet. Die Kennlinien (simuliert für $w = 1\mu\text{m}$, anschließend entsprechend der Kanalweite im Experiment mit 2000 multipliziert) zeigen qualitativ die gleichen ambipolaren Eigenheiten wie die experimentellen in Abb. 7.2, eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment konnte jedoch bisher nicht erreicht werden. Insbesondere kann bisher der allmähliche Anstieg des Transistorstromes mit anfangs positiver Krümmung für Au-Source in der Simulation nicht beschrieben werden, für Mg-Source erhält man nicht den beobachteten sub-linearen Anstieg des Sättigungsstromes für Gate-Source-Spannungen $V_{\text{GS}} > 20\text{V}$. Ohne eine Modellierung dieser Effekte durch weitere Annahmen, ist eine bessere Übereinstimmung wohl auch kaum zu erreichen. Der hohe Wert der Elektronenbeweglichkeit im Pentacen ist vor allem zur Beschreibung des steilen Anstiegs des Elektroneninjektionsstromes für Au-Source erforderlich. Bei den hier gewählten Beweglichkeiten wird sich sowohl der Loch- als auch der Elektronenkanal an der Grenzfläche zum Oxid im Pentacen ausbilden. Die Simulation ergab tatsächlich, dass hier eine Variation der Beweglichkeit im P13 keinen signifikanten Einfluß auf die Ausgangskennlinien hat. Der Wert von $\mu_{\text{n}} = \mu_{\text{p}} = 5.0 \times 10^{-3}\text{cm}^2/\text{Vs}$ ist daher in diesem Fall recht willkürlich, eine Änderung hat kaum Einfluß. Solange die Elektronenbeweglichkeit in P13 nicht wesentlich größer ist als in Pentacen, ist der Elektronenstrom im Pentacen

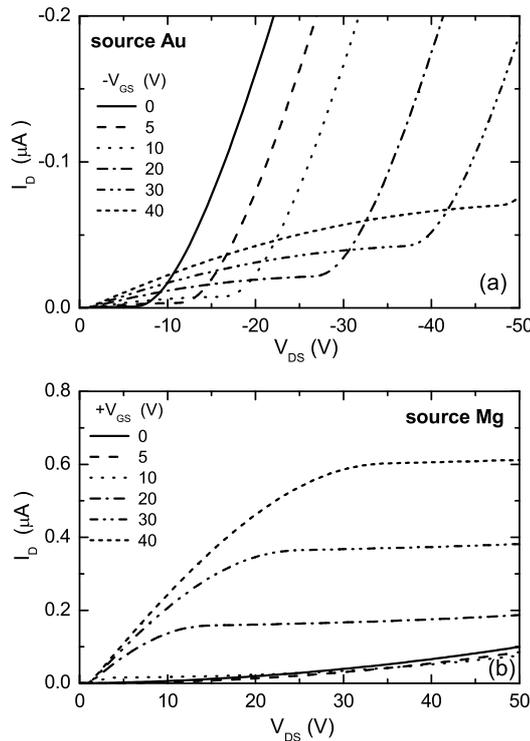


Abbildung 8.6: Simulierte Ausgangskennlinien für Au-Source (a) (man vergleiche mit Abb. 7.2a) und für Mg-Source (b) (man vergleiche mit Abb. 7.2b), Variation der Gatespannung wie angegeben. Pentacen: $\mu_n = 1.1 \times 10^{-2} \text{cm}^2/\text{Vs}$, $\mu_p = 2.0 \times 10^{-4} \text{cm}^2/\text{Vs}$; P13: $\mu_n = \mu_p = 5.0 \times 10^{-3} \text{cm}^2/\text{Vs}$, $Q_{it} = -8.0 \times 10^{11} \text{e cm}^{-2}$, $R = 25 \text{M}\Omega$, $\Phi_{\text{Au}} = 5.0 \text{eV}$, $\Phi_{\text{Mg}} = 3.66 \text{eV}$. Die Kanalweite beträgt hier $w = 2000 \mu\text{m}$.

aufgrund der dort größeren Elektronenkonzentration bestimmend (siehe Abbn. 8.4 und 8.5). Gleiches gilt für die Lochbeweglichkeit, allerdings muß für einen signifikanten Lochstrom im P13 der Unterschied in den Beweglichkeiten beider Schichten entsprechend dem größeren Unterschied der Löcherdichten noch größer sein. Für Au-Source in Abb. 8.6a setzt der Elektronen-Injektionsstrom bei etwas kleineren negativen Drain-Source-Spannungen als im Experiment ein. Eine bessere Übereinstimmung dieses Einsatzes kann mit einer größeren negativen Grenzflächenladung von $Q_{it} = -1.5 \times 10^{12} \text{e cm}^{-2}$ erreicht werden. Dann tritt jedoch für Mg-Source bei einer Gatespannung von $V_{GS} = +10 \text{V}$ kein Transistorstrom mehr auf, die Kennlinie beginnt dann im Gegensatz zum Experiment mit positiver Krümmung. Daher wurde der kleinere Wert von $Q_{it} = -8.0 \times 10^{11} \text{e cm}^{-2}$ bevorzugt. Durch einen Serienwiderstand kann für Mg-Source die sub-lineare Abhängigkeit des Drainstromes von der Gatespannung im aktiven Bereich beschrieben werden. Vergleicht man in Abb. 8.6b die Kennlinien für größere Gatespannungen, so beginnen diese bei kleinen Drainspannungen mit nahezu dem gleichen Anstieg, ein Verhalten wie es die experimentellen Kurven in Abb. 7.2b zeigen. Der gewählte Wert von $R = 25 \text{M}\Omega$ scheint realistisch. Schätzt man anhand der gemessenen Kennlinien aus dem Anstieg des Elektronenstromes für Au-Source oder aus dem Anstieg der Transistorkennlinien im aktiven Bereich für Mg-Source einen Widerstand ab, erhält man vergleichbare Werte.

Für die experimentelle Struktur wurden die beiden aktiven Materialien unter der Annahme ausgewählt, dass Pentacen als Loch-Transportschicht und P13 als Elektronen-Transportschicht dient. Damit sollte in Pentacen die Löcherbeweglichkeit größer als die Elektronenbeweglichkeit sein, P13 entsprechend eine größere Be-

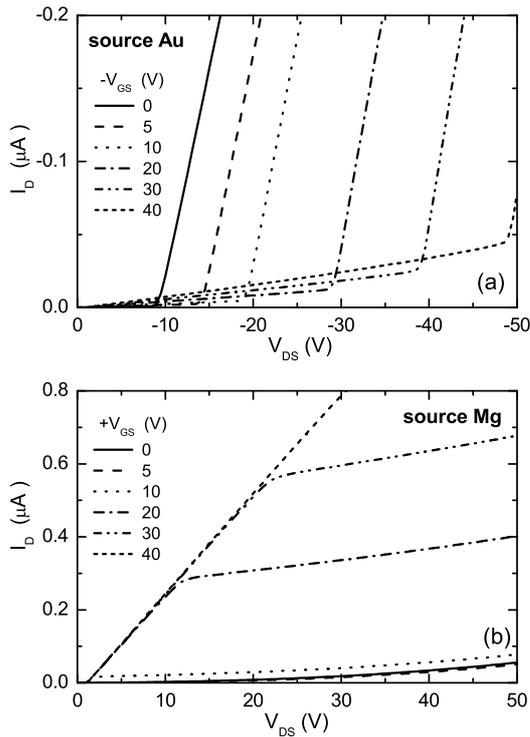


Abbildung 8.7: Simulierte Ausgangskennlinien für Au-Source (a) (man vergleiche mit Abb.7.2a) und für Mg-Source (b) (man vergleiche mit Abb.7.2b), Variation der Gatespannung wie angegeben. Pentacen: $\mu_n = 1.0 \times 10^{-5} \text{cm}^2/\text{Vs}$, $\mu_p = 5.0 \times 10^{-5} \text{cm}^2/\text{Vs}$; P13: $\mu_n = 9.0 \times 10^{-2} \text{cm}^2/\text{Vs}$, $\mu_p = 1.0 \times 10^{-2} \text{cm}^2/\text{Vs}$, $Q_{it} = -1.2 \times 10^{12} \text{e cm}^{-2}$, $R = 0$, $\Phi_{\text{Au}} = 5.0 \text{eV}$, $\Phi_{\text{Mg}} = 3.66 \text{eV}$. Die Kanalweite beträgt hier $w = 2000 \mu\text{m}$.

weglichkeit für Elektronen besitzen. Soll weiterhin die Ausbildung zweier separater Kanäle, also einem Lochkanal im Pentacen an der Oxidgrenzfläche und einem Elektronenkanal im P13 am Heteroübergang, wie es in Ref. [121] vorgeschlagen wurde, zutreffen, so muß nach den Ergebnissen des vorherigen Abschnittes zusätzlich die Elektronenbeweglichkeit in P13 wesentlich größer sein als in Pentacen. Diese Bedingungen wurden bei den Ausgangskennlinien in Abb.8.7 berücksichtigt. Es wurden für die Austrittsarbeiten die Werte von Abb.8.6 beibehalten, ein etwas größerer Wert der Grenzflächenladung verwendet und es ist kein zusätzlicher Serienwiderstand berücksichtigt worden. Die Löcherbeweglichkeit in Pentacen bestimmt den Strom bei kleinen Drainspannungen für Au-Source und den Injektionsstrom bei größeren Drainspannungen für Mg-Source, die Elektronenbeweglichkeit in P13 entsprechend den Injektionsstrom für Au-Source und die Größe des Stromes für Mg-Source. Die anderen beiden Beweglichkeiten wurden relativ willkürlich gewählt, ihr Einfluß ist unter diesen Bedingungen vernachlässigbar (und in Pentacen sollte ja $\mu_n < \mu_p$ gelten). Bei dieser Parameterwahl erhält man für Au-Source keine Sättigung des Löcherstromes, die Kennlinien steigen zunächst linear und anschließend mit geringer positiver Krümmung stetig an bis der steile Anstieg des injizierten Elektronenstromes einsetzt. Für Mg-Source beobachtet man auch ohne einem zusätzlichen Serienwiderstand für kleine Drain-Source-Spannungen die schwache Abhängigkeit des Stromes von der Gatespannung. Die Kennlinien für größere Gate-Source-Spannungen beginnen mit dem gleichen linearen Anstieg und gehen schließlich ziemlich abrupt in einen Bereich geringeren Anstiegs über. In Abb.8.8 sind die Elektronen- und Löcherstromdichten für Au-Source (a) und Mg-Source (b) für $|V_{GS}| = 10\text{V}$ und $|V_{DS}| = 16\text{V}$ dargestellt. Im Fall von Au-Source ist bei diesen Spannungen noch kein Elektronenkanal aus-

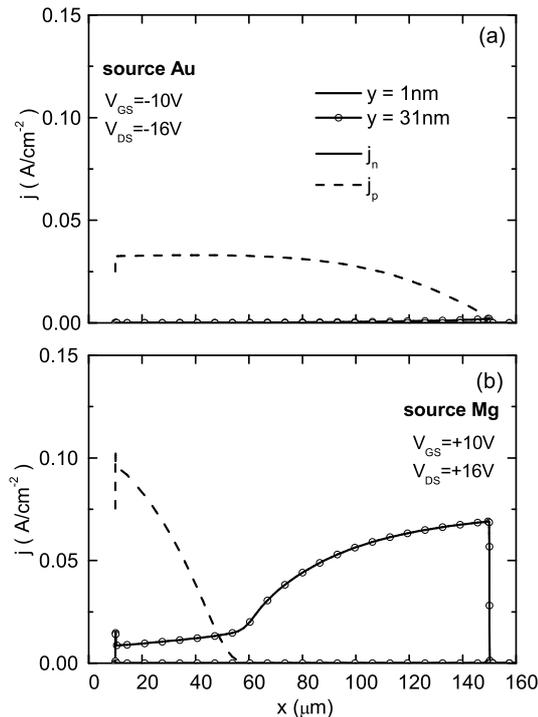


Abbildung 8.8: Elektronen- und Lochstromdichten 1nm oberhalb der Oxid/Pentacen-Grenzfläche ($y = 1nm$, ohne Symbol) sowie 1nm oberhalb der Pentacen/P13- Grenzfläche ($y = 31nm$, mit Symbol) für die Strom-Spannungs-Kennlinien in Abb.8.7 bei $|V_{GS}| = 10V$ und $|V_{DS}| = 16V$ für Au-Source (a) und Mg-Source (b).

gebildet, der Lochstrom fließt an der Grenzfläche zum Oxid. Für Mg-Source sind beide Kanäle vorhanden, der Elektronenstrom fließt an der Pentacen/P13- Grenzfläche. Aufgrund der gewählten Beweglichkeiten sind der Elektronenstrom in Pentacen und der Löcherstrom in P13 vernachlässigbar. Die bei kleinen Drainspannungen geringe Abhängigkeit des Stromes von der Gatespannung in Abb.8.7b ergibt sich aus der Tatsache, dass die Elektronenkonzentration an der Pentacen/P13- Grenzfläche wesentlich weniger stark mit der Gatespannung variiert als an der Grenzfläche zum Oxid, da das Feld durch die dortigen negativen Ladungen abgeschirmt wird. Nur der Übergang in die Sättigung verschiebt sich bei größerer Gatespannung zu einer entsprechend größeren Drainspannung. Insgesamt entsprechen bei dieser Parameterwahl die simulierten Ausgangskennlinien jedoch weniger den experimentellen Kennlinien als die Kennlinien aus Abb. 8.6.

8.4 Zusammenfassung

Es wurden numerische Simulationen für den Heterostruktur-OFET (Abb. 8.1) durchgeführt. Die Strom-Spannungs-Kennlinien zeigten wiederum die gleichen Eigenheiten des ambipolaren Verhaltens, wie es bereits in Kapitel 7 in der Einsicht-Modellstruktur beobachtet wurde. Zunächst ist der Einfluß von Mg als top-Kontakt untersucht worden. Man erhält in diesem Fall größere Elektronenströme, ein Effekt, welcher bereits in Kapitel 4 beschrieben wurde ([E5]). Wie der Lochkanal bildet sich auch der Elektronenkanal im wesentlichen an der Grenzfläche zum Oxid im Pentacen aus, außer die Elektronenbeweglichkeit der zweiten ‚Elektronen-Transport-Schicht‘ ist mehrere Größenordnungen größer als in Pentacen. Für letzteren Fall

ergeben sich jedoch Kennlinien, welche die experimentellen Daten weniger gut beschreiben, dieser scheint somit gegenüber einer Ausbildung beider Kanäle an der Oxidgrenzfläche weniger realistisch. Durch die größere Affinität (reduzierte Barriere) der zweiten Schicht wird die Elektroneninjektion verbessert. Ein Versuch einer Anpassung der Simulation an die experimentellen Daten aus Abb. 7.2 wurde vorgestellt, eine befriedigende Übereinstimmung konnte jedoch bisher nicht erzielt werden. Insbesondere kann der allmähliche Anstieg des Transistorstromes mit anfangs positiver Krümmung für Au-Source sowie der sub-lineare Anstieg des Sättigungsstromes bei Gate-Source-Spannungen $V_{GS} > 20V$ für Mg-Source nicht in der Simulation beschrieben werden. Ursache sind möglicherweise weitere Einflüsse durch die Kontakte, auch eventuell vorhandene Trapzustände in den aktiven Materialien wurden bisher nicht betrachtet. Ziel weiterführender Arbeiten soll es sein, eine bessere Übereinstimmung zwischen Simulation und experimentellen Daten zu erreichen. Ergänzend sollen die Untersuchungen auf lichtemittierende ambipolare Transistoren erweitert werden.

Kapitel 9

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der Simulation und Modellierung organischer Feldeffekt-Transistoren (OFETs). Mittels numerischer Simulation wurden detaillierte Untersuchungen zu mehreren Problemstellungen durchgeführt.

In Kapitel 4 wurde der Einfluß verteilter Trapzustände auf Transistorkennlinien untersucht. Insbesondere sind exponentiell verteilte Zustände innerhalb der Bandlücke der aktiven Schicht untersucht worden, eine Verteilung analog dem sogenannten a-Si- oder TFT-Modell. Dieses Modell dient der Beschreibung von Dünnschicht-Transistoren mit einer aktiven Schicht aus amorphen Silizium und wird teils auch für organische Dünnschicht-Transistoren als zutreffend angesehen. Ein Vergleich von experimentellen Kennlinien und der Simulation ergab, dass keine gute Übereinstimmung zu erzielen ist. Diese wäre nur erreichbar, wenn man für Ausgangskennlinien unterschiedlicher Gatespannung eine andere Zustandsdichte der Traps annimmt, eine eher unrealistische Annahme. Besonders aufgrund der Dominanz von Hysterese-Effekten in den experimentellen Kennlinien, kann jedoch keine endgültige Aussage über die Gültigkeit des a-Si-Modells getroffen werden. Eine befriedigende Beschreibung konnte jedoch mit folgenden Annahmen erreicht werden: Das Bulk-Material der aktiven Schicht ist trap-frei, allerdings existieren donatorartige Grenzflächenzustände an der Grenzfläche zum Gateoxid. Zusätzlich werden Grenzflächenladungen angenommen, deren Konzentration jeweils in Abhängigkeit von der Gatespannung angepaßt wird. Für weitere Untersuchungen könnten Arbeiten derart sinnvoll sein, inwieweit eindeutige Aussagen über den zugrundeliegenden Transportmechanismus anhand einer einzelnen gemessenen Abhängigkeit überhaupt möglich sind. Verschiedene Modelle liefern, abhängig von den zu wählenden Modellparametern, zum Teil ähnliche Abhängigkeiten. Experimentelle Daten könnten so möglicherweise durch mehrere Modelle befriedigend angepaßt werden, insbesondere wenn diese nur in einem begrenzten Parameterbereich vorliegen. Möglicherweise müssen die zu wählenden Modellparameter (z.B. Zustandsdichte) selbst separat gemessen werden, um eindeutige Schlußfolgerungen ziehen zu können.

Gegenstand von Kapitel 5 war der source-gated Dünnschicht-Transistor (SGT), seine Arbeitsweise konnte im Detail aufgezeigt werden. Dies geschah am Beispiel eines Transistors auf der Basis von a-Silizium als aktiver Schicht. Die Ergebnisse lassen sich jedoch analog auch auf organische Transistoren übertragen. Es wird geschlußfolgert, dass der SGT ein gewöhnlich betriebener Dünnschicht-Transistor ist, limitiert durch das Sourcegebiet mit großem Widerstand. Diese Aussage folgt allein

aus der Verteilung der inneren Feld- und Dichteprofile.

Weiterhin wurde in Kapitel 6 untersucht wie sich Trapzustände auf quasistatische Kapazitäts-Spannungs-Kennlinien organischer MOS-Kondensatoren auswirken und welche Hysterese-Formen dadurch entstehen können. Aus den Ergebnissen läßt sich schlußfolgern, dass allein die Umladung von Trapzuständen nicht Ursache für die experimentell beobachteten Hysteresen in organischen Bauelementen sein kann. Bezüglich der Ursache für die beobachteten Hysteresen sowohl in OFETs als auch in organischen MOS-Kondensatoren wird folgende Ursache favorisiert und durch die bisherigen Simulationsergebnisse auch gestützt: Die Hysterese wird nicht durch einen einzelnen Prozeß allein verursacht, sondern entsteht aus einer Kombination von mindestens zwei Prozessen. Dies könnte zum einen langsamer Transport sein, d.h. speziell hier der Antransport von Polaronen oder den beweglichen Gegenionen zur Grenzfläche. Ein weiterer Prozeß ist die direkte Polaronen-Bipolaronen-Reaktion oder aber eine Komplexbildungsreaktion von Bipolaronen mit Gegenionen, beide finden bevorzugt an der Grenzfläche zum Oxid statt und können die beobachtete Verschiebung der Flachbandspannung verursachen. Eine numerische Überprüfung dieser Modellvorstellung ist Gegenstand zukünftiger Untersuchungen.

Anhand eines Einschicht-Modellsystems wurde weiterhin in Kapitel 7 die Arbeitsweise von double-injection (ambipolar) organischen Feldeffekt-Transistoren untersucht. Es konnte der entscheidende Einfluß der Kontakte sowie die Abhängigkeit gegenüber Variationen von Materialparametern gezeigt werden. Sowohl der Kontakteinfluß als auch Rekombination sind entscheidend für die Arbeitsweise, jedoch existiert bisher kein Modell, welches diese Effekte in Betracht zieht. Dazu sind numerische 2D-Simulationen notwendig und wurden hier erstmalig detailliert durchgeführt. Zusätzlich wurden Möglichkeiten und Einschränkungen für die Datenanalyse mittels einfacher analytischer Ausdrücke erörtert. Es zeigte sich, dass diese nicht immer zur Auswertung von Kennlinien herangezogen werden dürfen.

Neuere experimentelle Daten liegen von einem ambipolaren organischen Heterostruktur-TFT vor. In Kapitel 8 sind erste Ergebnisse zur Simulation dieser Kennlinien gezeigt worden, eine befriedigende Übereinstimmung gelang jedoch bisher nicht. Grund dafür sind weitere Effekte, welche die Kennlinien beeinflussen und in den Simulationen nicht berücksichtigt werden. Diese rühren vermutlich von den Kontakten her, auch eventuell vorhandene Trapzustände in den aktiven Materialien wurden bisher nicht berücksichtigt. Gegenstand zukünftiger Arbeiten ist es, eine bessere Beschreibung der experimentellen Daten zu erreichen.

Publikationen

- [E1] A. Nesterov, G. Paasch, S. Scheinert, T. Lindner, *Simulation study of the influence of polymer modified anodes on organic LED performance*, Synth. Met. 130, 165-175 (2002).
- [E2] G. Paasch, T. Lindner, S. Scheinert, *Variable range hopping as possible origin of a universal relation between conductivity and mobility in disordered organic semiconductors*, Synth. Met. 132, 97-104 (2002).
- [E3] S. Scheinert, G. Paasch, T. Lindner, *Relevance of organic field effect transistor models: Simulation vs. experiment*, Synth. Met. 137, 1451 (2003).
- [E4] T. Lindner, G. Paasch, S. Scheinert, *Application of the amorphous-silicon model to organic field effect transistors*, 48. Internationales Wissenschaftliches Kolloquium 22.-25.9.2003, TU Ilmenau, 2003, p 241-242, ISSN-Nr. 0943-7207, full-length text: Th. Lindner, G. Paasch, S. Scheinert, *Anwendung des a-Si TFT Modells auf organische Feldeffekt-Transistoren*, 48. Internationales Wissenschaftliches Kolloquium 22.-25.September 2003, TU Ilmenau, 2003, CD ROM (Section 6.2), ISSN-Nr. 1619-4098.
- [E5] T. Lindner, G. Paasch, S. Scheinert, *The influence of distributed trap states on the characteristics of top and bottom contact organic field-effect transistors*, J. Mater. Res. 19, 2014 (2004).
- [E6] T. Lindner, G. Paasch, S. Scheinert, *Simulated Operation and Properties of Source-Gated Thin-Film Transistors*, IEEE Trans. Electron Devices 52, 47 (2005).
- [E7] G. Paasch, Th. Lindner, C. Rost, S. Karg, W. Riess, S. Scheinert, *Operation and Properties of Ambipolar Organic Field-Effect Transistors*, J. Appl. Phys., angenommen.
- [E8] Th. Lindner, G. Paasch, S. Scheinert, *Hysteresis in organic field-effect devices: Simulated effects due to trap recharging*, J. Appl. Phys., eingereicht.

Literaturverzeichnis

- [1] D.D. Eley, *Nature* 162, 819 (1948).
- [2] T. Ito, H. Shirakawa, S. Ikeda, *J. Polym. Sci. Chem. Ed.* 12, 11 (1974).
- [3] H. Shirakawa, E.J. Louis, A.G. MacDiarmid, C.K. Chiang, A.J. Heeger, *J. Chem. Soc. Chem. Comm.*, 579 (1977).
- [4] C.K. Chiang, C.R. Fischer, Y.W. Park, A.J. Heeger, H. Shirakawa, E.J. Louis, S.C. Gau, A.G. MacDiarmid, *Phys. Rev. Lett.* 39, 1098 (1977).
- [5] M. Ozaki, D.L. Peebles, B.R. Weinberger, C.K. Chiang, S.C. Gau, A.J. Heeger, A.G. MacDiarmid, *Appl. Phys. Lett.* 35, 83 (1979).
- [6] S.R. Forrest, M.L. Kaplan, P.H. Schmidt, *J. Appl. Phys.* 55, 1492 (1984).
- [7] S.R. Forrest, L.Y. Leu, F.F. So, W.Y. Yoon, *J. Appl. Phys.* 66, 5908 (1989).
- [8] A. Tsumura, H. Koezuka, T. Ando, *Appl. Phys. Lett.* 49, 1210 (1986).
- [9] C.-L. Cheng, S.R. Forrest, M.L. Kaplan, P.H. Schmidt, *B. Tell, Appl. Phys. Lett.* 47, 1217 (1985).
- [10] C.W. Tang, *Appl. Phys. Lett.* 48, 183 (1986).
- [11] G. Yu, J. Gao, J.C. Hummelen, F. Wudl, A.J. Heeger, *Science* 270, 1789 (1995).
- [12] C.W. Tang, S.A. van Slyke, *Appl. Phys. Lett.* 51, 913 (1987).
- [13] J.H. Burroughes, D.D.C. Bradley, A.R. Brown, R.N. Marks, K. Mackay, R.H. Friend, P.L. Burns, A.B. Holmes, *Nature* 347, 539 (1990).
- [14] A. Dodabalapur, Z. Bao, A. Makhija, J.G. Laquindanum, V.R. Raju, Y. Feng, H.E. Katz, J. Rogers, *Appl. Phys. Lett.* 73, 142 (1998).
- [15] T.N. Jackson, Y.-Y. Lin, D.J. Gundlach, H. Klauk, *IEEE J-STQE* 4, 100 (1998).
- [16] E.Y. Ma, S.D. Theiss, M.H. Lu, C.C. Wu, J.C. Sturm, S. Wagner, *IEDM, Technical Digest*, 535 (1997).
- [17] H.E.A. Huitema, G.H. Gelinck, J.B.P.H. van der Putten, K.E. Kuijk, C.M. Hart, E. Cantatore, P.T. Herwig, A.J.J.M. van Breemen, D.M. de Leeuw, *Nature* 414, 599 (2001).

- [18] D.M. de Leeuw, P.W.M. Blom, C.M. Hart, C.M.J. Mutsaers, C.J. Dury, M. Matters, H. Termeer, IEDM, Technical Digest, 331 (1997).
- [19] Y.-Y. Lin, A. Dodabalapur, R. Sarpeshkar, Z. Bao, W. Li, K. Baldwin, V.R. Raju, H.E. Katz, Appl. Phys. Lett. 74, 2714 (1999).
- [20] B. Crone, A. Dodabalapur, Y.-Y. Lin, R.W. Filas, Z. Bao, A. LaDuca, R. Sarpeshkar, H.E. Katz, W. Li, Nature 403, 521 (2000).
- [21] C.J. Drury, C.M.J. Mutsaers, C.M. Hart, M. Matters, D.M. de Leeuw, Appl. Phys. Lett. 73(1) 108 (1998).
- [22] G.H. Gelinck, T.C.T. Geuns, D.M. de Leeuw, Appl. Phys. Lett. 77, 1487 (2000).
- [23] M. Matters, D.M. de Leeuw, M.J.C.M. Vissenberg, C.M. Hart, P.T. Herwig, T. Geuns, C.M.J. Mutsaers, C.J. Drury, Optical Materials 12, 189 (1999).
- [24] H. Sirringhaus, N. Tessler, R.H. Friend, Science 280, 1741 (1998).
- [25] Z. Bao, A. Dodabalapur, A.J. Lovinger, Appl. Phys. Lett. 69, 4108 (1996).
- [26] H. Sirringhaus, R.J. Wilson, R.H. Friend, M. Inbasekaran, W. Wu, E.P. Woo, M. Grell, D.D.C. Bradley, Appl. Phys. Lett. 77, 406 (2000).
- [27] A. Afzali, C.D. Dimitrakopoulos, T.L. Breen, J. A. Chem. Soc. 12, 8812 (2002).
- [28] Z. Bao, Y. Feng, A. Dodabalapur, V.R. Raju, A.J. Lovinger, Chem. Mater. 9, 1299 (1997).
- [29] H. Sirringhaus, T. Kawase, R.H. Friend, T. Shimoda, M. Inbasekaran, W. Wu, E.P. Woo, Science 290, 2123 (2000).
- [30] J.A. Rogers, Z. Bao, A. Makhija, P. Braun, Ad. Mater. 11, 741 (1999).
- [31] N. Stutzmann, R.H. Friend, H. Sirringhaus, Science 299, 1881 (2003).
- [32] S. Scheinert, T. Doll, A. Scherer, G. Paasch, I. Hörselmann, Appl. Phys. Lett. 84, 4427 (2004).
- [33] A. Bonfiglio, F. Mamelli, O. Sanna, Appl. Phys. Lett. 82, 3550 (2003).
- [34] A.R. Brown, A. Pomp, D.M. de Leeuw, D.B.M. Klaassen, E.E. Havinga, P. Herwig, K. Müllen, J. Appl. Phys. 79, 2136 (1996).
- [35] G. Horowitz, R. Hajlaoui, D. Fichou, A. El Kassmi, J. Appl. Phys. 85, 3202 (1999).
- [36] S. Scheinert, G. Paasch, S. Pohlmann, H.-H. Hörhold, R. Stockmann, Solid-State Electronics 44, 845 (2000).
- [37] Y.-Y. Lin, D.J. Gundlach, S.F. Nelson, Th.N. Jackson, IEEE Trans. Electron. Devices 44, 1325 (1997).

- [38] H. Sirringhaus, N. Tessler, D.S. Thomas, P.J. Brown, R.H. Friend, *Adv. Solid State Phys.* 39, 101 (1999).
- [39] S. Scheinert, G. Paasch, T. Doll, *Synth. Met.* 139, 233 (2003).
- [40] L. Torsi, A. Dodabalapur, H.E. Katz, *J. Appl. Phys.* 78, 1088 (1995).
- [41] J. Ficker, A. Ullmann, W. Fix, H. Rost, W. Clemens, *J. Appl. Phys.* 94, 2638 (2003).
- [42] R. Parashkov, E. Becker, G. Ginev, T. Riedl, H.-H. Johannes, W. Kowalsky, *J. Appl. Phys.* 95, 1594 (2004).
- [43] S. Scheinert, G. Paasch, S. Pohlmann, H.-H. Hörhold, R. Stockmann, *Proceedings ESSDERC'99*, Editions Frontiers, 1999, p.704.
- [44] H. Koezuka, A. Tsumura, H. Fuchigami, K. Kuramoto, *Appl. Phys. Lett.* 62, 1794 (1993).
- [45] H. Fuchigami, A. Tsumura, H. Koezuka, *Appl. Phys. Lett.* 63, 1372 (1993).
- [46] S. Scheinert, G. Paasch, *phys. stat. sol. (a)* 201, 1263 (2004).
- [47] S.M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, Wiley Interscience, New York, 1981.
- [48] A.R. Brown, D.M. de Leeuw, E.E. Havinga, A. Pomp, *Synth. Met.* 68, 65 (1994).
- [49] R. Tecklenburg, G. Paasch, S. Scheinert, *Adv. Mater. Opt. Electron.* 8, 285 (1998).
- [50] ISE-TCAD, Integrated Systems Engineering AG, Zürich, Switzerland, 1995-1999.
- [51] R.E. Bank, D.J. Rose, W. Fichtner, *IEEE Trans. Electr. Dev.* ED-30, 1031 (1983).
- [52] R.S. Varga, *Matrix Iterative Analysis*, Englewood Cliffs, Prentice-Hall, 1962.
- [53] R.E. Bank, W.M. Coughran, W. Fichtner, E.H. Grosse, D.J. Rose, K. Smith, *IEEE Trans. CAD-4*, 436 (1985).
- [54] R.E. Bank, D.J. Rose, *Num. Math.* 37, 279 (1981).
- [55] S. Selberherr, *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*, Springer-Verlag, Wien, 1984.
- [56] V.L. Bonč-Bruevič, S.G. Kalašnikov, *Halbleiterphysik*, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1982.
- [57] Y. Tsididis, *Operation and Modeling of The MOS Transistor*, WBC/McGraw-Hill, 1999.

- [58] Y. Taur, T.H. Ning, *Fundamentals of Modern VLSI Devices*, Cambridge University Press, 1998.
- [59] E.H. Nicollian, J. R. Brews, *MOS Physics and Technology*, Wiley, New York, 1982.
- [60] P.S. Davids, A. Saxena, D.L. Smith, *J. Appl. Phys.* 78, 4244 (1995).
- [61] G. Paasch, P.H. Nguyen, S.-L. Drechsler, *Synth. Met.* 97, 255 (1998).
- [62] P.H. Nguyen, S. Scheinert, S. Berleb, W. Brütting, G. Paasch, *Org. Electron.* 2, 105 (2001).
- [63] M. Pope, C.E. Swenberg, *Electronic processes in organic crystals*, Oxford University Press, New York, 1982.
- [64] R. Farchioni, G. Grosso (Eds.), *Organic electronic materials. Conjugated polymers and low molecular weight organic solids*, Springer, 2001.
- [65] E.A. Silinsh, V. Capek, *Organic molecular crystals; interaction, localization and transport phenomena*, AIP Press, 1994.
- [66] K.C. Kao, W. Hwang, *Electrical Transport in Solids*, Pergamon Press, 1981.
- [67] S. Scheinert, G. Paasch, M. Schrödner, H.-K. Roth, S. Sensfuß, Th. Doll, *J. Appl. Phys.* 92, 330 (2002).
- [68] G. Paasch, S. Scheinert, R. Tecklenburg, *Proceedings ESSDERC'97*, Editions Frontiers, 1997, p.636.
- [69] S. Scheinert, G. Paasch, R. Tecklenburg, *Proceedings ESSDERC'98*, Editions Frontiers, 1998, p.628.
- [70] S. Scheinert, G. Paasch, R. Tecklenburg, D. Schipanski, 43rd International Scientific Colloquium 1998, TU Ilmenau, 1998, p.305.
- [71] M.C.J.M. Vissenberg, M. Matters, *Phys. Rev. B* 57, 12964 (1998).
- [72] G. Horowitz, P. Delannoy, *J. Appl. Phys.* 70, 469 (1991).
- [73] M. Shur, M. Hack, J.G. Shaw, *J. Appl. Phys.* 66, 3371 (1989).
- [74] M. Shur, M. Hack, *J. Appl. Phys.* 55, 3831 (1984).
- [75] J.G. Shaw, M. Hack, *J. Appl. Phys.* 64, 4562 (1988).
- [76] K.Y. Chung, G.W. Neudeck, *J. Appl. Phys.* 62, 4617 (1987).
- [77] *ATLAS User's Manual: Device Simulation Software*, SILVACO International, Santa Clara. Version 1.5.0 (1997).
- [78] G. Horowitz, R. Hajlaoui, P. Delannoy, *J. Phys. III (France)* 5, 355 (1995).
- [79] F. Schauer, *J. Appl. Phys.* 86, 524 (1999).

- [80] G. Horowitz, *Adv. Mater.* 10, 365 (1998).
- [81] G. Horowitz, M.E. Hajlaoui, R. Hajlaoui, *J. Appl. Phys.* 87, 4456 (2000).
- [82] A.R. Völkel, R.A. Street, D. Knipp, *Phys. Rev. B* 66, 195226 (2002).
- [83] N. Tessler, Y. Roichman, *Appl. Phys. Lett.* 79, 2987 (2001).
- [84] Y. Roichman, N. Tessler, *Appl. Phys. Lett.* 80, 151 (2002).
- [85] T. Li, J.W. Balk, P.P. Ruden, I.H. Campbell, D.L. Smith, *J. Appl. Phys.* 91, 4312 (2002).
- [86] T. Li, P.P. Ruden, I.H. Campbell, D.L. Smith, *J. Appl. Phys.* 93, 4017 (2003).
- [87] S. Scheinert, G. Paasch, P.H. Nguyen, S. Berleb, W. Brütting, *Proceedings ESSDERC'00*, Editions Frontiers, 2000, p.444.
- [88] S. Scheinert, W. Schliefer, *Synthetic Metals* 139, 501 (2003).
- [89] P.J. Brown, H. Sirringhaus, M. Harrison, M. Shkunov, R.H. Friend, *Phys. Rev. B* 63, 125204 (2001).
- [90] A.R. Brown, C.P. Jarrett, D.M. de Leeuw, M. Matters, *Synth. Met.* 88, 37 (1997).
- [91] G. Paasch, *Solid-State Ionics* 169, 87 (2004).
- [92] J.M. Shannon, E.G. Gerstner, *IEEE Electron Device Lett.* 24, 405 (2003).
- [93] J.M. Shannon, E.G. Gerstner, *Solid-State Electron.* 48, 1155 (2004).
- [94] J.M. Shannon, *Appl. Phys. Lett.* 85, 326 (2004).
- [95] G.W. Neudeck, H.F. Bare, K.Y. Chung, *IEEE Trans. Electron Devices* ED-34(2), 344 (1987).
- [96] E.H. Rhoderick, R.H. Williams, *Metal-Semiconductor Contacts*, Clarendon Press, Oxford, 1988.
- [97] S. Miyazaki, M. Narasaki, A. Suyama, M. Yamaoka, H. Murakami, *Appl. Surf. Sci.* 216, 252 (2003).
- [98] J. Kanicki, *Appl. Phys. Lett.* 53(20), 1943 (1988).
- [99] M. Hack, M. Shur, *J. Appl. Phys.* 58(2), 997 (1985).
- [100] M. Shur, C. Hyun, M. Hack, *J. Appl. Phys.* 59(7), 2488 (1986).
- [101] M. Kitamura, T. Imada, Y. Arakawa, *Jpn. J. Appl. Phys.* 42, 2483 (2003).
- [102] Y.K. Lee, K.M. Kim, J.I. Ryu, Y.D. Kim, K.H. Yoo, J. Jang, H.Y. Jeong, D.J. Choo, *J. Korean Phys. Society* 39, S291 (2001).

-
- [103] A.J. Heeger, S. Kivelson, J.R. Schrieffer, W.-P. Su, *Rev. Mod. Phys.* 60, 781 (1988).
- [104] N. Kirova, S. Brazovskii, *Synth. Met.* 76, 229 (1996).
- [105] R.A. Street, A. Salleo, M.L. Chabinyo, *Phys. Rev. B* 68, 085316 (2003).
- [106] G. W. Neudeck, A.K. Malhotra, *J. Appl. Phys.* 46, 239 (1975).
- [107] H. Pfeiderer, W. Kusian, B. Bullemer, *Siemens Forsch.- u. Entwickl. Ber. Bd.* 14, 69 (1985).
- [108] H. Pfeiderer, W. Kusian, B. Bullemer, *Siemens Forsch.- u. Entwickl. Ber. Bd.* 14, 114 (1985).
- [109] H. Pfeiderer, *IEEE Transaction on Electron Devices* ED-33, 145 (1986).
- [110] H. Pfeiderer, W. Kusian, *Solid-State Electronics* 29, 317 (1986).
- [111] M. Hack, M. Shur, W. Czubyty, *Appl. Phys. Lett.* 48, 1386 (1986).
- [112] G. W. Neudeck, K. Y. Chung, H. F. Bare, *IEEE Transaction on Electron Devices* ED-34, 866 (1987).
- [113] H.-C. Lin, M.-F. Wang, C.-Y. Lu, T.-Y. Huang, *Solid-State Electronics* 47, 247 (2003).
- [114] T. Hasegawa, K. Mattenberger, J. Takeya, B. Batlogg, *Phys. Rev. B* 69, 245115 (2004).
- [115] T. Shimada, T. Sugai, Y. Ohno, S. Kishimoto, T. Mizutani, H. Yoshida, T. Okazaki, H. Shinohara, *Appl. Phys. Lett.* 84, 2412 (2004).
- [116] H. Riel, S. Karg, T. Beierlein, B. Ruhstaller, W. Rieß, *Appl. Phys. Lett.* 82, 466 (2003).
- [117] M.-H. Lu, M.S. Weaver, T.X. Zhou, M. Rothman, R.C. Kwong, M. Hack, J.J. Brown, *Appl. Phys. Lett.* 81, 3921 (2002).
- [118] G. Cheng, Y. Zhao, Y. Zhang, S. Liu, F. Hee, H. Zhang, Y. Ma, *Appl. Phys. Lett.* 84, 4457 (2004).
- [119] E. J. Meijer, D. M. de Leeuw, S. Estalles, E. van Veenendaal, B.-H. Huisman, P. W. M. Blom, J. C. Hummelen, U. Scherf, T. M. Klapwijk, *Nature Materials* 2, 678 (2003).
- [120] A. Dodabalapur, H. E. Katz, L. Torsi, R. C. Haddon, *Appl. Phys. Lett.* 68, 1108 (1996).
- [121] C. Rost, D. J. Gundlach, S. Karg, W. Rieß, *J. Appl. Phys.* 95, 5782 (2004).
- [122] C. Rost, S. Karg, W. Rieß, M. A. Loi, M. Murgia, M. Muccini, *Appl. Phys. Lett.* 85, 1613 (2004).

-
- [123] A. Hepp, H. Heil, W. Weise, M. Ahles, R. Schmechel, H. von Seggern, *Phys. Rev. Lett.* 91, 147406 (2003).
- [124] T. Sakanoue, E. Fujiwara, R. Yamada, H. Tada, *Appl. Phys. Lett.* 84, 3037 (2004).
- [125] H.C. Pao, C.T. Sah, *Solid-State Electron.* 9, 927 (1966).
- [126] N. Karl, in *Organic Electronic Materials*, Springer Series in Materials Science, Vol. 41, ed. by R. Farchioni and G. Grosso, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2001, p. 231.
- [127] P.G. Schroeder, C.B. France, J.B. Park, B.A. Parkinson, *J. Appl. Phys.* 91, 3010 (2002).
- [128] *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, ed. by D. R. Lide, 77th edition, CRC Press, Boca Raton, 1996.
- [129] M. Hiramoto, K. Ihara, H. Fukusumi, M. Yokohama, *J. Appl. Phys.* 78, 7153 (1995).
- [130] L. Bürgi, T. J. Richards, R. H. Friend, H. Sirringhaus, *J. Appl. Phys.* 94, 6129 (2003).
- [131] *Philips Journal of Research* Vol. 51(4), 479 (1998).

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen des Schwerpunktprogramms „Organische Feldeffekt-Transistoren“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft durchgeführt. Sie entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden (IFW) in der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. H. Eschrig, ihm danke ich für seine Unterstützung.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. G. Paasch, der mir die Möglichkeit gab, diese Arbeit anzufertigen und wesentlich zum Gelingen der Arbeit beigetragen hat. Danke für die stets sehr gute Betreuung und die angenehme Zusammenarbeit.

Großen Anteil an der Diskussion der Simulationsergebnisse hat weiterhin Frau Dr. S. Scheinert von der Technischen Universität Ilmenau (Kooperationspartner im Projekt). Dort wurden auch die experimentellen Arbeiten zum OFET auf Basis von MEH-TPD-PPV und den organischen MOS-Kondensatoren durchgeführt.

Weiterhin möchte Herrn Dr. A. Nesterov danken, der mir den Einstieg in DESSIS erleichterte.

Die Messungen zum ambipolaren OFET stammen aus der Arbeitsgruppe um Dr. W. Rieß von IBM Zürich. Ihm sei für die Möglichkeit der Kooperation zu diesem Thema gedankt.

Weiterhin gilt mein Dank der Arbeitsgruppe des Instituts für Theoretische Festkörperphysik am IFW. Frau U. Nitzsche half stets bei allen computertechnischen Problemen. An dieser Stelle sei auch Herrn Priv. Doz. Dr. M. Richter und den Doktoranden der Arbeitsgruppe für unsere Ashcroft/Mermin-Besprechungen gedankt.

Mein Dank geht schließlich auch an meine Eltern für die Unterstützung in allen Lebenslagen.

Versicherung

Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Diese Dissertation wurde unter der Betreuung von Prof. Dr. H. Eschrig und der fachlichen Anleitung von Prof. Dr. G. Paasch am Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden e. V. angefertigt.

Ich erkenne die Promotionsordnung der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften der TU Dresden an.

Dresden, den 22.09.2004

Thomas Lindner

