

**Título em Português:** Efeitos de interface em transistores orgânicos

**Título em Inglês:** Interface effects in organic transistors

**Autor:** Luiza Batista Capuzzo

**Instituição:** Universidade de São Paulo

**Unidade:** Instituto de Física de São Carlos

**Orientador:** Paulo Barbeitas Miranda

**Área de Pesquisa /**  
Física da Matéria Condensada

**SubÁrea:**

**Agência Financiadora:** CNPq - PIBIC

## EFEITOS DE INTERFACE EM TRANSISTORES ORGÂNICOS

**Luiza Batista Capuzzo**  
**Marcos da Silva Sousa**  
**Paulo Barbeitas Miranda**

Instituto de Física de São Carlos/Universidade de São Paulo

luizacapuzzo@usp.br

### Objetivos

Os transistores orgânicos por efeito de campo (OFETs) são peças fundamentais na eletrônica orgânica, e sua performance pode ser aprimorada pela funcionalização da interface dielétrico-semicondutor, crucial para a mobilidade dos portadores de carga. Monocamadas automontadas (SAMs) são uma estratégia promissora, pois alteram a química da superfície, potencialmente melhorando o desempenho dos OFETs.

A espectroscopia vibracional por geração de soma de frequências (SFG) é uma técnica excelente para caracterizar essas monocamadas, permitindo analisar a configuração molecular em interfaces (1). Essa caracterização é crucial para compreender o impacto das SAMs nos dispositivos.

Assim, o objetivo do projeto é desenvolver um processo de fabricação de OFETs que seja compatível com SAMs, possibilitando a correlação entre o desempenho dos dispositivos e a conformação molecular das monocamadas. Este estudo pode abrir novas oportunidades para a eletrônica orgânica.

### Métodos e Procedimentos

Transistores por efeito de campo possuem três terminais: dreno, fonte e porta (ou *gate*). Foram fabricados transistores na arquitetura *bottom-gate bottom-contact* (com o *gate*, dreno e fonte abaixo do semicondutor), sem e com funcionalização por SAMs na interface semicondutor-isolante, permitindo a comparação de desempenho elétrico. O

processo de fabricação inclui cinco etapas: limpeza dos substratos, deposição do *gate* de alumínio por evaporação, formação do dielétrico de óxido de alumínio por método eletrolítico, deposição do dreno e fonte de ouro por evaporação, e deposição do polímero semicondutor. Para transistores funcionalizados, há um passo adicional: deposição da monocamada de ODPA (ácido octadecilfosfônico) após tratamento com plasma de oxigênio na superfície do óxido de alumínio (2).

A caracterização elétrica dos transistores foi feita pela análise da curva de saída, que mede a corrente entre dreno e fonte em função da tensão do dreno para diferentes tensões do *gate*.

Finalmente, a espectroscopia SFG é uma das melhores técnicas para avaliar a qualidade das monocamadas, já que o espectro SFG dos estiramentos CH de SAMs é sensível à conformação e ao grau de compactação das cadeias. Se as cadeias de ODPA estiverem em conformação *trans*, os grupos CH<sub>2</sub> têm simetria de inversão, o que proíbe sua contribuição ao processo SFG. Caso contrário, ocorre quebra de simetria, permitindo a observação de seus modos de estiramento.

### Resultados

As Figuras 1 e 2 mostram as curvas de saída de um dispositivo sem e outro com a monocamada de ODPA. Observa-se que a corrente entre dreno e fonte no dispositivo com a monocamada é cem vezes maior que no dispositivo sem a monocamada. Esse

desempenho superior é atribuído à excelente conformação da monocamada, comprovada pelas medidas de espectroscopia SFG. A superfície altamente hidrofóbica altera o empacotamento e a orientação do polímero semiconductor, aumentando significativamente a mobilidade das cargas.

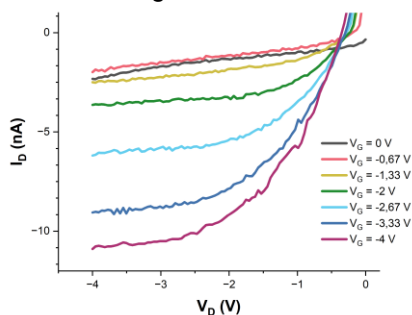


Figura 1: Curva de saída de OFET sem ODPA

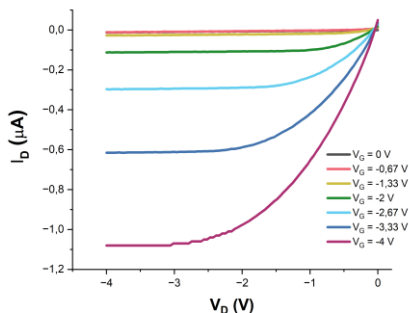


Figura 2: Curva de saída de OFET com ODPA

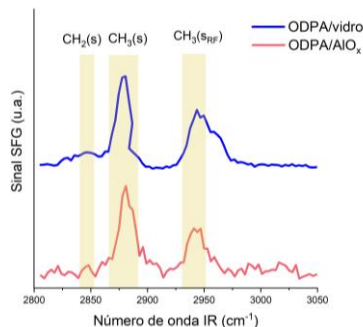


Figura 3: Espectro SFG das SAMs de ODPA

A espectroscopia SFG permitiu avaliar a qualidade das monocamadas pela sua conformação. Na Figura 3, aparecem picos em torno de 2880  $\text{cm}^{-1}$ , indicativos do estiramento simétrico do grupo terminal  $\text{CH}_3$ , e em  $\sim 2940 \text{ cm}^{-1}$ , associado à ressonância de Fermi do

estiramento simétrico  $\text{CH}_3$ . Além disso, percebe-se que em  $\sim 2850 \text{ cm}^{-1}$ , frequência relativa ao estiramento simétrico dos grupos  $\text{CH}_2$  ao longo da cadeia hidrofóbica, não há nenhum pico, o que indica que as moléculas estavam com as cadeias estendidas, típicas de SAMs bem ordenadas e compactadas.

## Conclusões

Este projeto investigou a fabricação e caracterização de transistores orgânicos por efeito de campo (OFETs) funcionalizados com monocamadas automontadas (SAMs) de ácido octadecilfosfônico (ODPA), com o intuito de melhorar o desempenho desses dispositivos. Os resultados mostraram que a presença da monocamada de ODPA na interface dielétrico-semicondutor elevou significativamente a corrente entre dreno e fonte, além de reduzir a histerese, proporcionando maior estabilidade operacional. A caracterização das SAMs indicou uma ótima organização molecular, essencial para o desempenho superior dos OFETs. Esses achados destacam a relevância da funcionalização de interfaces e abrem caminho para futuras investigações na interação entre polímeros semicondutores e SAMs, visando avanços na eletrônica orgânica.

## Agradecimentos

Agradeço ao CNPq pelo financiamento para a realização deste trabalho através do projeto de código 2023-1703, e aos membros do Grupo de Polímeros Bernhard Gross pelo apoio técnico.

## Referências

1. **Alex G Lambert, Paul B Davies, David J Neivandt.** Implementing the theory of sum frequency generation vibrational spectroscopy: A tutorial review. *Applied Spectroscopy Reviews*. 2005, Vol. 40, pp. 103–145.
2. **Chiho Katagiri, Kouki Akaike, Takayuki Miyamae.** Relationship between the surface structure of the gate insulator and the performance of organic thin-film transistors. *Organic Electronics*. 2020, Vol. 86, p. 105928.

## INTERFACE EFFECTS IN ORGANIC TRANSISTORS

**Luiza Batista Capuzzo**  
**Marcos da Silva Sousa**  
**Paulo Barbeitas Miranda**

São Carlos Institute of Physics/University of São Paulo

luizacapuzzo@usp.br

### Objectives

Organic field-effect transistors (OFETs) are key components in organic electronics, and their performance can be enhanced by functionalizing the dielectric-semiconductor interface, which is crucial for charge carrier mobility. Self-assembled monolayers (SAMs) represent a promising strategy as they modify surface chemistry, potentially improving OFET performance.

Sum-frequency generation vibrational spectroscopy (SFG) is an excellent technique for characterizing these monolayers, enabling the analysis of molecular configuration at interfaces (1). This characterization is essential for understanding the impact of SAMs on devices.

Thus, the objective of this project is to develop a fabrication process for OFETs compatible with SAMs, allowing for the correlation between device performance and the monolayers' conformation. This study could open new opportunities in organic electronics.

### Methods and Procedures

Field-effect transistors have three terminals: drain, source, and gate. Transistors were fabricated in the bottom-gate bottom-contact architecture (with the gate, drain, and source below the semiconductor), both with and without functionalization by SAMs at the dielectric-semiconductor interface, enabling comparison of their electrical performance. The fabrication process included five stages: substrate cleaning, aluminum gate deposition

by evaporation, aluminum oxide dielectric formation via the electrolytic method, gold drain and source deposition by evaporation, and deposition of the semiconductor polymer. For functionalized transistors, there was an additional step: deposition of the ODP (octadecylphosphonic acid) monolayer following oxygen plasma treatment on the aluminum oxide surface (2).

Electrical characterization of the transistors was performed by analyzing the output curve, which measures the current between drain and source as a function of the drain voltage for different gate voltages.

Finally, SFG spectroscopy is one of the best techniques to assess the quality of the monolayers, as the SFG spectrum of the SAMs' CH stretches is sensitive to the chain conformation and packing density. If the ODP chains are in a *trans* conformation, the CH<sub>2</sub> groups have inversion symmetry, which prohibits their contribution to the SFG process. Otherwise, symmetry breaking occurs, allowing the observation of their stretching modes.

### Results

Figures 1 and 2 show the output curves of a device without and with the ODP monolayer. It is observed that the drain-source current in the device with the monolayer is one hundred times greater than that for the device without the monolayer. This superior performance is attributed to the excellent conformation of the monolayer, confirmed by the SFG spectroscopy measurements. The highly hydrophobic surface alters the packing and orientation of the

semiconductor polymer, significantly increasing charge mobility.

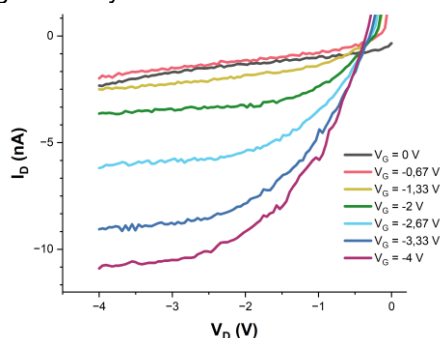


Figure 1: OFET output curve without ODPA

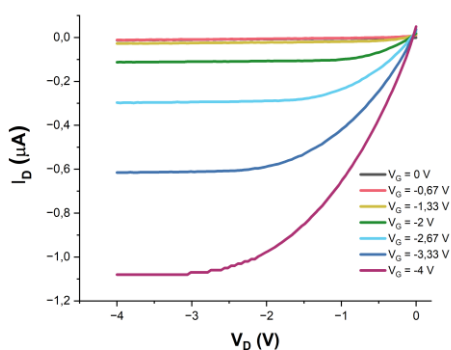


Figure 2: OFET output curve with ODPA

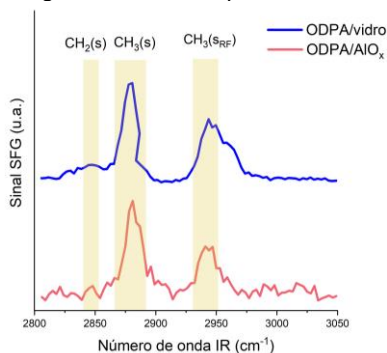


Figure 3: SFG spectrum of the ODPA SAMs

SFG spectroscopy enabled the evaluation of monolayer quality by their conformation. In Figure 3, peaks appear around  $2880\text{ cm}^{-1}$ , indicative of the symmetric stretch of the terminal  $\text{CH}_3$  group, and around  $2940\text{ cm}^{-1}$ , associated with the Fermi resonance of the symmetric  $\text{CH}_3$  stretch. Additionally, at  $\sim 2850\text{ cm}^{-1}$ , the frequency relative to the symmetric

stretch of  $\text{CH}_2$  groups along the hydrophobic chain, no peak is observed, indicating that the molecules had straight chains, typical of well-ordered and compact SAMs.

## Conclusion

This project investigated the fabrication and characterization of organic field-effect transistors (OFETs) functionalized with self-assembled monolayers (SAMs) of octadecylphosphonic acid (ODPA) to improve device performance. The results showed that the presence of the ODPA monolayer at the dielectric-semiconductor interface significantly increased the drain-source current and reduced hysteresis, providing greater operational stability. The characterization of the SAMs indicated a high molecular organization, which is essential for superior OFET performance. These findings underscore the relevance of interface functionalization and pave the way for future investigations into the interaction between semiconductor polymers and SAMs, aiming for advancements in organic electronics.

## Acknowledgements

I thank CNPq for funding this work through project code 2023-1703 and the members of the Bernhard Gross Polymer Group for technical support.

## References

1. **Alex G Lambert, Paul B Davies, David J Neivandt.** Implementing the theory of sum frequency generation vibrational spectroscopy: A tutorial review. *Applied Spectroscopy Reviews*. 2005, Vol. 40, pp. 103–145.
2. **Chiho Katagiri, Kouki Akaike, Takayuki Miyamae.** Relationship between the surface structure of the gate insulator and the performance of organic thin-film transistors. *Organic Electronics*. 2020, Vol. 86, p. 105928.