



补充材料

基于有机光电突触晶体管的储池计算网络

杜晓松¹, 顾健晖¹, 彭立超¹, 孙金瑞¹, 姜赛^{1,2*}, 李昀^{2*}

¹ 常州大学微电子与控制工程学院, 常州 213164

² 南京微结构国家实验室, 人工微结构科学与技术协同创新中心, 电子科学与工程学院, 南京 210093

*通讯作者, E-mail: saijiang@cczu.edu.cn; yli@nju.edu.cn

引用格式: Liu ZH, Li J, Han L, Li Y, Wang RX. Development of a high-quality benchmark for scoring function assessment. Sci Sin Chem, 2015, doi: 10.1360/N032015-00115



Note 1. 非对称电极结构仿真

使用 COMSOL Multiphysics 对器件结构进行了有限元分析, 在仿真过程中, 模型对半导体界面与电磁波界面进行耦合。在半导体物理方面, 为了获得光电响应在半导体节点上添加了光学传感。添加了金和银两种金属触点作为电极, 与有机半导体层相连。在零电压偏置下连接到有机半导体层。对于电磁波(频域)的物理原理, 将上边界和下边界分别设置为输入端口和输出端口并且电模场设置为 $(0, 0, 1)$ V/m, 传播常数为 ewfd.k rad/m 。几何网格的元素大小设置为正常。然后, 我们计算了电场和电流密度。基于不对称肖特基触点平面二极管的模拟结果显示内置电场的方向是 从银电极指向金电极(图 R1)。



图 R1.用 COMSOL 软件模拟突触装置中的电场分布和电流密度, 箭头表示总电流密度。



Note 2. 晶体管建模

为模拟能够在电路仿真中使用高性能 OFET 相关的电学特性和器件结构, 我们提出了一个紧凑的直流模型。在该模型中, OFET 按照渐进沟道近似法 (GCA) 表示为理想 MOS 与分别在源极和漏极处的两个反向偏压肖特基二极管的串联组合。之所以需要在理想 MOS 的两端都加入一个肖特基二极管, 是因为通过理想 MOS 沟道的电流方向取决于 V_{DS} 的符号, 而在 V_{DS} 的两种符号情况下都必须考虑接触效应。在建模晶体管的时候, 使用压控电流源 (voltage controlled current sources, VCCS) 实现器件电流方程。首先理想 MOS 的电流电压关系如等式(1):

$$I_{OTFT} = F(V_{GC}) - F(V_{GD}) + I_{off} \quad (1)$$

其中, I_{off} 是关断电流, V_{GC} 和 V_{GD} 分别为 G 端与 C 端、G 端与 D 端之间的电压。 $F(V)$ 是 V 和 I 之间的关系。关于 $F(V)$ 和 I_{off} 的表达式如下:

$$\begin{aligned} F(V) &= K_1 \frac{W_{eff}}{L_{Early}} (V_{SS} \log(1 + e^{\frac{V - V_{FB}}{V_{SS}}}))^m \\ I_{off} &= I_{00} \frac{W_{eff}}{L_{Early}} V_{DC} \\ L_{Early} &= L - dL_{vds} |V_{DC}| \end{aligned} \quad (1)$$

K_1 是前置因子, 取决于载流子迁移率和栅极绝缘体的单位面积电容, W_{eff} 是晶体管的有效沟道宽度, L 代表沟道的几何长度, V_{SS} 是一个参数, 取决于传输特性的次阈值斜率, V_{DC} , V_{GC} 和 V_{GD} 是 D、C 和 G 端子之间的电位差, V_{FB} 是与晶体管阈值电压有关的电压, I_{off} 是关断电流, m 是与上述传输特性的阈值行



为有关的指数, L_{Early} 受到漏极偏置调制的影响, dL_{Vds} 是用于确定沟道长度调制的参数, I_{00} 是截止电流预因子。

等式 (2) 表示肖特基二极管的 I - V 关系:

$$I_{\text{diode}} = -I_{\text{rev}} \left(e^{\frac{qV_{\text{CS}}}{\eta kT}} - 1 \right) \quad (2)$$

其中, I_{rev} 是二极管的反向电流, 取决于 V_{CS} (肖特基效应) 和 V_{GS} (栅极二极管)。

我们可以通过下面的公式计算 I_{rev} :

$$I_{\text{rev}} = I_{00d} W_{\text{nom}} \left[\left(\frac{\max(V_{\text{GS}} - V_{\text{gg0}}, 0)}{V_{\infty}} \right)^{\beta} + \left(\frac{V_{\text{gmin}} - V_{\text{gg0}}}{V_{\infty}} \right)^{\beta} \right] e^{\left(\frac{V_{\text{CD}}}{V_{\text{diode}}} \right)^{\alpha}}$$

(2)

V_{CS} (V_{GS}) 是 C 端和 S 端 (G 端和 S 端) 之间的电位差, I_{rev} 是二极管的反向电流, 取决于 V_{CS} (肖特基效应) 和 V_{GS} (栅极二极管), I_{00d} 是二极管反向电流的预因子, $V_{\infty} = 1 \text{ V}$ 是归一化系数, V_{diode} 和 α 是用于确定 I_{rev} 和 V_{CS} 关系的参数, β , V_{gmin} 和 V_{gg0} 是决定 I_{rev} 和 V_{GS} 关系的参数, η , q , k , and T 分别表示理想二极管系数, 基本电荷、玻尔兹曼常数和绝对温度。电路仿真软件(如 Verilog-a)可求解下面有关 V_{CS} 的方程:

$$I_{\text{diode}}(V_{\text{CS}}, V_{\text{GS}}) = I_{\text{OTFT}}(V_{\text{CS}}, V_{\text{GS}}, V_{\text{DS}}) \quad (3)$$

晶体管的完整 SPICE 模型还包括了三个电阻。电阻可防止串联电流源引起的收敛问题, 并且电阻的阻值为 $100 \text{ G}\Omega$, 相当于开路, 不会影响漏极电流。根据紧凑型直流模型, p 型和 n 型 OFET 的转移拟合曲线与实验数据非常吻合。



两个晶体管的拟合曲线与实际数据的皮尔逊相关系数分别为 0.76 和 0.98, 属于强相关关系。此外, 由一个 p 型 OFET 和一个 n 型 OFET 组成的反相器显示出优异的电压传输特性和高增益。



Note 3. 突触模拟电路

正文中的非线性微分方程在稳态时可以简化, 稳态 EPSC 由下式给出:

$$\hat{I}_{syn} = \frac{I_g}{I_\tau} (I_\omega - I_\tau) \quad (6)$$

如果我们修改 V_w 使得 $I_w \gg I_\tau$, 那么 $\hat{I}_{syn} \gg I_g$ 。因此当 I_{syn} 演化为 \hat{I}_{syn} 时, 公式(6)可以写成如下形式:

$$\tau \frac{d}{dt} I_{syn} + I_{syn} = \frac{I_\omega I_g}{I_\tau} \quad (7)$$

其中 $I_g = I_{0,p} \exp[-\kappa_p (V_{thr} - V_{dd})]$, $I_\tau = I_{0,p} \exp[-\kappa_p (V_\tau - V_{dd})]$, $I_\omega = I_{0,n} \exp[\kappa_n V_\omega]$, $I_{0,p}$ 是 p 型 OFET 的亚阈值下漏极电流, κ_p 是亚阈值摆幅因子, M_w 的栅极电压 (V_w)、 M_{thr} 的栅极电压 (V_{thr})、 M_τ 的栅极电压 (V_τ)。



Note 4. 突触电路中 V_w , V_{th} , V_T 和 C_{syn} 对输出的影响。

我们将使用输出电流脉冲的上升时间（电流脉冲从 10 % 上升到 90 % 所需的时间）、下降时间（电流脉冲从 90 % 下降到 10 % 所需的时间）和电流振幅（电流脉冲从底部到顶部的值）来表征参数的影响。我们首先改变 V_T ，结果表明 V_T 的变化对下降时间和电流振幅有很大影响，可使两者同时发生显著变化(图 S1a)。然后，我们改变 V_{thr} ，在减小 V_{thr} 的过程中，电流振幅增大，但对上升时间和下降时间的影响较弱(图 S1b)。此外，我们改变 V_w ，发现 V_w 对电流振幅的影响与 V_{thr} 相反(图 S1c)。 V_w 对上升时间和下降时间的影响也很小。 C_{syn} 的影响很明显，主要是对电流脉冲上升时间和下降时间的影响，对电流幅值的影响可以忽略(图 S1d)。

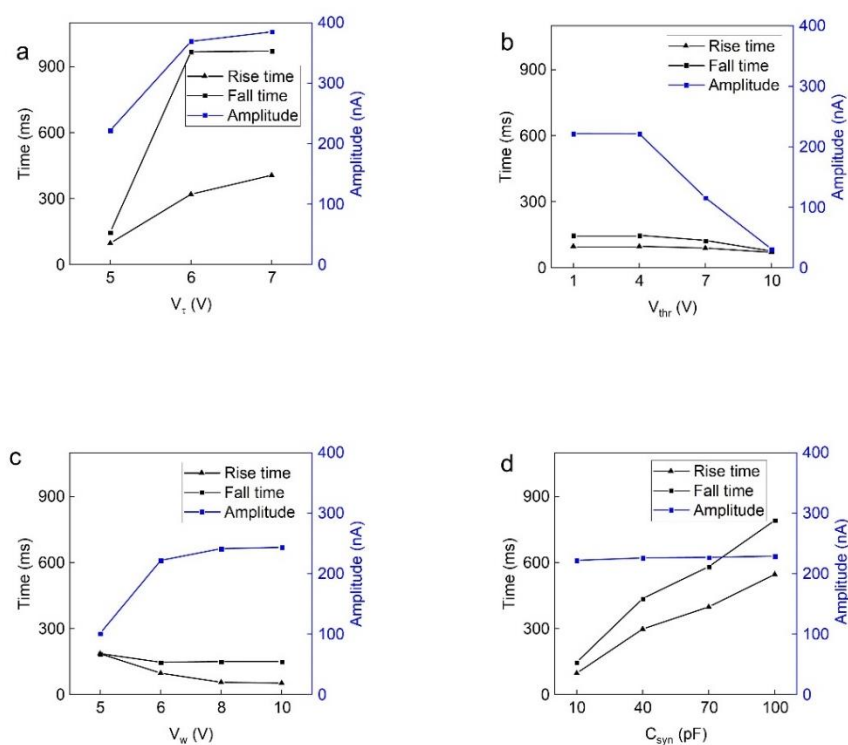




图 S1. 电路仿真电流输出的上升时间、下降时间（黑色）和振幅（蓝色）的情况，当 $V_{DD} = 16\text{ V}$ ， V_{in} 为 0 V 至 10 V ，周期为 2 s 的方波，其他电路参数设置为：(a) $V_{thr} = 1\text{ V}$ ， $V_w = 8\text{ V}$ ， $C_{syn} = 10\text{ pF}$ ，不同的 V_T 值；(b) $V_T = 5\text{ V}$ ， $V_w = 8\text{ V}$ ， $C_{syn} = 10\text{ pF}$ ，不同的 $V_{T\ thr}$ 值；(c) $V_T = 8\text{ V}$ ， $V_{thr} = 1\text{ V}$ ， $C_{syn} = 10\text{ pF}$ ，不同的 V_w 值；(d) $V_T = 8\text{ V}$ ， $V_{thr} = 1\text{ V}$ ， $V_w = 8\text{ V}$ ，不同的 C_{syn} 值。

Figure S1. The rise time, fall time (Black) and amplitude (Blue) of circuit simulation current output when $V_{DD} = 16\text{ V}$ ， V_{in} ranges from 0 V to 10 V with a period of 2 s ，and circuit parameters are set as: (a) $V_{thr} = 1\text{ V}$ ， $V_w = 8\text{ V}$ ， $C_{syn} = 10\text{ pF}$ ，and different V_T . (b) $V_T = 5\text{ V}$ ， $V_w = 8\text{ V}$ ， $C_{syn} = 10\text{ pF}$ ，and different $V_{T\ thr}$. (c) $V_T = 8\text{ V}$ ， $V_{thr} = 1\text{ V}$ ， $C_{syn} = 10\text{ pF}$ ，and different V_w . (d) $V_T = 8\text{ V}$ ， $V_{thr} = 1\text{ V}$ ， $V_w = 8\text{ V}$ ，and different C_{syn} .



Note 5. 神经元模拟电路

神经元模拟电路主要由两个电容器、一个复位 p 型 OFET 和一个四级有机放大器组成(图 S2a)。首先电路处于充电阶段,输入电压首先对膜电容器 C_{mem} 充电,膜电压 V_{mem} 从 0 逐渐升高。当 V_{mem} 达到 4 V 开关电压时(此时也代表电容已经充电完毕),输出电压 V_{out} 的值将从 0 快速变为电源电压 V_{dd} 。由于高电位 V_{out} 使复位 p 型 OFET 接通, $I_{\text{in}} < I_{\text{reset}}$ (I_{in} 为输入电流, I_{reset} 为 M_{reset} 的传导电流)。所有的输入都从复位 OFET 流向地,此时膜电容器也开始放电, V_{mem} 逐渐下降。 V_{mem} 的变化情况如下式:

$$(C_{\text{mem}} + C_{\text{fb}}) \frac{d}{dt} V_{\text{mem}} = I_{\text{in}} - I_{\text{reset}} \quad (4)$$

当 V_{mem} 下降到 4 V 时, V_{out} 从 V_{dd} 快速变为 0,从而关闭复位 p 型 OFET,使电容器继续充电。模拟电路的输出 V_{out} 是从 0 快速变为电源电压 V_{dd} ,再从 V_{dd} 快速变为 0 的脉冲形式。整个神经元模拟电路就是不断的进行充电、输出电压产生脉冲,放电,再充电的循环。

神经元模拟电路使用以下参数进行模拟: $V_{\text{dd}} = 10 \text{ V}$, $I_{\text{in}} = 100 \text{ nA}$, $C_{\text{mem}} = 5 \text{ nF}$, $C_{\text{fb}} = 10 \text{ nF}$, V_{in} 代表范围为幅值为 13 V、周期为 10 s 的脉冲方波输入。 C_{mem} 和 C_{fb} 的值分别为 5 和 10 nF。结果显示,当输入为高电压时,输出为频率固定的电压脉冲(图 S2b)。然后改变 C_{mem} 和 C_{fb} 的值来调制电路输出。结果显示,改变 C_{mem} 对输出电压脉冲上升和下降时间的影响要比 C_{fb} 大得多,而对周期的影响则微乎其微(图 S2c)。当 C_{mem} 保持不变而 C_{fb} 发生变化时,周期变化更快。此外,下降

时间的变化也远小于上升时间的变化(图 S2d)。

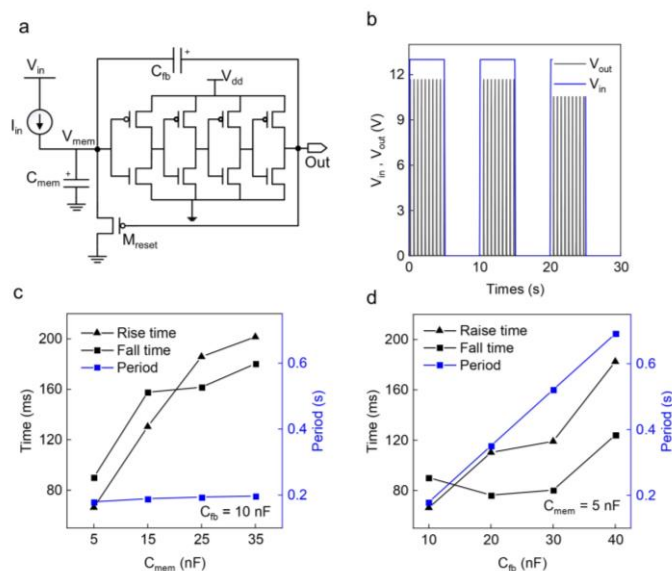


图 S2.神经元模拟电路: (a) 神经元模拟电路原理图; (b) 神经元模拟电路输出电压随着输入电压脉冲的变化曲线。电路仿真电流输出的上升时间、下降时间(黑色)和振幅(蓝色)的情况, 当 $V_{dd} = 10$ V, $I_{in} = 100$ nA, V_{in} 代表范围为幅值为 13 V、周期为 10 s 的脉冲方波输入, 其他参数设置为: (c) $C_{fb} = 10$ nF 和不同的 C_{mem} 值; (d) $C_{mem} = 5$ nF 和不同的 C_{fb} 。

Figure S2. Simulation of organic neurons analog circuit. (a) The analog circuit of neurons. (b) The curve of output voltage with input voltage pulses for neurons analogue circuits. The rise time, fall time (Black) and amplitude (Blue) of circuit simulation current output when $V_{dd} = 10$ V, $I_{in} = 100$ nA, V_{in} is a square wave pulse with an amplitude of 10 V and a period of 2 s, and circuit parameters are set as: (c) $C_{fb} = 10$ nF and different values of C_{mem} . (d) $C_{mem} = 5$ nF and different values of C_{fb} .

Note 6. 抑制型突触模拟电路

抑制型突触模拟电路的结构与激励型的突触模拟电路类似, 使用了四个 p 型有机晶体管, 两个 n 型有机晶体管和—个电容器(图 S3a)。他的电路输出电流与激励型的表现刚好相反, 当输入脉冲升高为高电平时, 输出电流反而降低, 当输入脉冲降低为低电平时, 输出电流升高(图 S3b)。

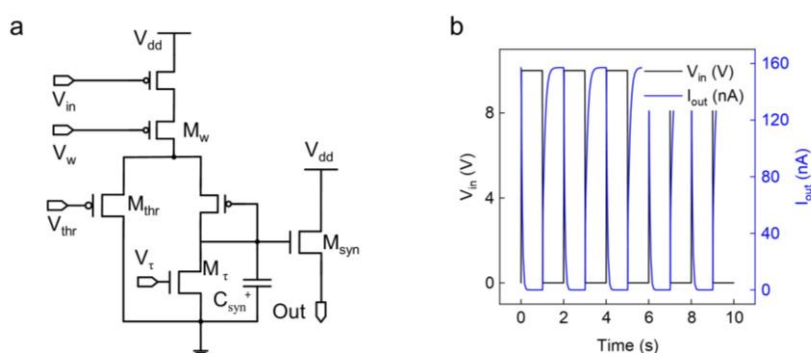


图 S3. 抑制型突触模拟电路 (a) 突触模拟电路设计图; (b) 突触模拟电路突触电流随着输入电压脉冲的变化曲线.

Figure S3. Simulation of organic inhibitory synaptic analog circuit. (a) The schematic diagram of biological synaptic. (b) The analog circuit of inhibitory synaptic. (c) The curve of inhibitory synaptic currents with input voltage pulses for synaptic analogue circuits.

Note 7. 原始 MNIST 的识别准确率及隐藏层节点数量对准确率的影响

为了更全面地评估模型的性能和稳定性,对 MNIST 原始数据的进行训练测试,整个网络对于 MNIST 数据集的识别准确率为 89.24%,经过数据对比我们发现对相对于原始数据,基于光电突触器件的储池计算网络对拥有噪声并将其去噪的识别准确率确实有所降低,但是准确率也达到了 86%左右(图 S4a),只低了 3%-5%,充分显示了突触器件有效的去噪能力以及突触模拟电路对储池计算网络有效的数据支持。

为了寻求训练成本和准确率之间的平衡,我们将输出层中间的隐藏层节点数作为一个调节的参数,当节点数为 0 时,代表着没有隐藏层,整个输出层就是一个 196-10 的单层全连接层,当节点数大于 0 的时候,就代表着有一层隐藏层具有一定数目的节点(图 S4b)。

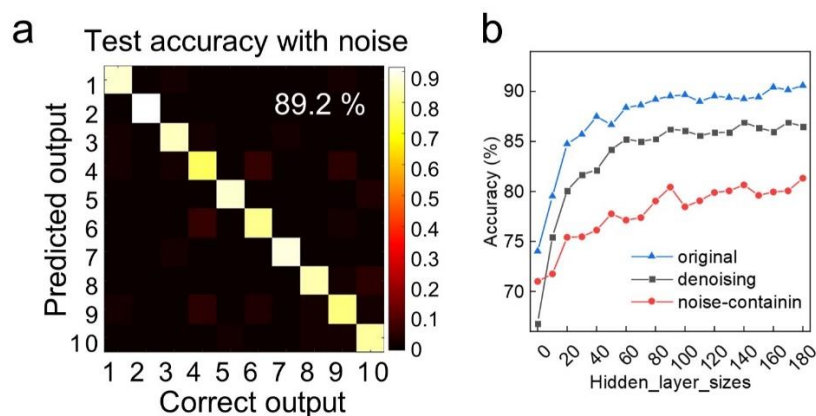


图 S4. 储池网络对 MNIST 数据集的识别准确率。(a)储池网络对原始 MNIST 数据集的识别准确率;(b)不同隐藏层节点数目下,储池网络对初始、加噪、去噪的 MNIST 数据集识别准确率。



Figure S4. The test accuracy of the reservoir computing network for the MNIST data set. (a) The test accuracy of the reservoir computing network for the original MNIST data set. (b) The test accuracy of the reservoir computing network for the original, noising, and denoising MNIST data set.