

Abstract

In recent years, the field of organic electronics has been experiencing a great expansion, due to several characteristics which candidate it as a main player in the definition of new markets comprising low-cost, flexible and bio-compatible electronics.

Although many experimental works on the optimization of organic devices have been performed, a real improvement in performance is subordinate to a good understanding of the underlying physical phenomena. At this purpose, computer-based simulations are of great importance for the determination of suitable high-level models and the identification of limiting factors.

This thesis is focused on the application of state-of-the-art Technology Computer Aided Design (TCAD) tools to organic electronics, aiming to show how models peculiar to this field can be integrated into a commercial, mass-production oriented software and exploited for the analysis and design of novel devices. In this respect, particular importance is given to Organic Phototransistors (OPTs) and Organic Photodiodes (OPDs), which rely on Bulk Heterojunction (BHJ) organic semiconductors in order to enhance the photogeneration quantum yield.

To study the transport properties of a BHJ, testbed Organic Field-Effect Transistors (OFETs) are fabricated on Silicon substrates with conventional techniques, such as spin-coating deposition. The current-voltage characteristics and impedance curves of the OFETs are described using TCAD simulations. This analysis shows how the transport of charge is limited by the presence of electronic traps in the material, which negatively affect the sub-threshold swing and cut-off frequency of the OFET.

These considerations can be directly applied to vertical OPTs. A comparative modeling study is performed in comparison to a planar OPT with means of TCAD simulations. Results show that vertical devices can outperform the planar ones in both electrical and optical characteristics, which confirms vertical OPT a promising technology due to the advantages of reduced channel length and large sensitive area.

The TCAD methodology also applies to the design rather than analysis only. This concept is demonstrated on a novel OPD architecture, in which a wire-grid polarizer is directly integrated into the device in order to make the photocurrent sensitive to light polarization. The OPD is studied and optimized using numerical simulations, stressing the effect of important physical and geometrical parameters. Consequently, a proof-of-concept of the OPD is demonstrated and the model is refined. A Monte Carlo approach is also proposed in order to enhance the semiconductor models used for the simulation of BHJ materials.

In conclusion, this work describes a complete framework in which organic electronics models are integrated with state-of-the-art TCAD tools. It is our opinion this approach will set the basis for a better understanding and design of organic electronic devices in the near future.

Abstract (Italiano)

Recentemente, il campo dell'elettronica organica è stato soggetto ad una forte espansione, grazie a diverse caratteristiche che lo candidano ad avere un ruolo importante nella definizione di nuovi mercati caratterizzati da dispositivi biocompatibili, flessibili ed a basso costo.

Sebbene diversi lavori sperimentali siano stati effettuati circa il perfezionamento dei dispositivi organici, un reale miglioramento delle loro prestazioni è subordinato alla comprensione dei meccanismi fisici che ne regolano il funzionamento. A questo proposito grande importanza rivestono le simulazioni al computer elettronico, in quanto consentono lo sviluppo di modelli di alto livello e l'identificazione di fattori limitanti.

Questa tesi tratta dell'applicazione di simulatori numerici allo studio dei dispositivi elettronici realizzati con semiconduttori organici, ponendosi come scopo quello di mostrare in che modo modelli peculiari di questa branca possano essere integrati all'interno di software commerciali e orientati alla produzione di massa, in modo da essere sfruttati per l'analisi e il progetto di nuovi dispositivi. A tale proposito, particolare importanza è data ai fototransistori e fotodiodi realizzati con miscele di due semiconduttori organici dalle diverse proprietà, molto utilizzate da un punto di vista tecnologico in quanto consentono di aumentare l'efficienza di resa quantica e la fotogenerazione ottica.

Per studiare le proprietà di trasporto di tali miscele, sono stati fabbricati dei transistori di prova su substrati convenzionali in Silicio cristallino mediante l'utilizzo di deposizione tramite spin-coating. Le caratteristiche corrente-tensione e le curve di impedenza dei transistori sono state descritte attraverso simulazioni numeriche. Tale analisi mostra come il trasporto di carica è limitato dalla presenza di trappole elettroniche nella miscela che influiscono negativamente sullo swing di sottosoglia e sulla frequenza di taglio dei transistori.

Tali considerazioni possono essere applicate direttamente ai fototransistori verticali. Uno studio basato su simulazioni numeriche è stato effettuato in maniera da confrontare le prestazioni di un fototransistore planare e di uno verticale. I risultati mostrano come i dispositivi verticali hanno migliori per-

formance sia da un punto di vista elettrico che ottico, il che conferma come i fototransistori verticali siano una tecnologia promettente grazie ad una ridotta lunghezza di canale e ad una grande area sensibile.

Una metodologia basata su simulazioni numeriche può essere applicata anche alla progettazione, oltre che all'analisi di tali dispositivi. Questo concetto è stato dimostrato su una nuova architettura di fotodiode, in cui un polarizzatore a griglia è stato direttamente integrato all'interno del dispositivo in modo da ottenere una fotocorrente sensibile alla polarizzazione della luce incidente. Tale architettura è stata in principio studiata e ottimizzata attraverso l'ausilio di simulazioni numeriche, stressando l'effetto di importanti parametri fisici e geometrici. Successivamente, un prototipo è stato realizzato a dimostrazione delle sue operazioni, rifinando di conseguenza il modello teorico utilizzato per il progetto. Un approccio basato su simulazioni di tipo Monte Carlo è stato inoltre proposto in modo da migliorare il modello impiegato per le simulazioni della miscela organica utilizzata come strato semiconduttore.

In conclusione, questo lavoro descrive una completa metodologia in cui modelli peculiari dell'elettronica organica sono integrati in simulatori numerici allo stato dell'arte per l'analisi e il progetto di dispositivi elettronici organici. È nostra opinione che tale approccio sarà alla base per una miglior comprensione di tali dispositivi in un futuro prossimo.