

Simulation numérique et caractérisation de matériaux semi-conducteurs III-N pour détecteurs ultraviolet et cellules solaires

Sidi HAMADY

sidi.hamady@univ-lorraine.fr

Habilitation à Diriger des Recherches

Université de Lorraine — ED 409 EMMA — LMOPS EA 4423 UL/CS

Membres du jury :

Rapporteurs :

M. Guilhem ALMUNEAU

CR CNRS, LAAS-CNRS – Toulouse

M. Nicolas BERTRU

PR, FOTON-CNRS INSA – Rennes

M. Xavier LETARTRE

DR CNRS, INL-CNRS – Lyon

Examineurs :

M^{me} Chantal FONTAINE

DR CNRS, LAAS-CNRS – Toulouse

Présidente

M. Nicolas FRESSENGEAS

PR, LMOPS – Metz

M. Hervé RINNERT

PR, IJL-CNRS – Nancy

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

Parcours

- ▶ Maître de conférences depuis février 2005 – UL/LMOPS
- ▶ Chercheur CNRS en CDD d'oct. 2003 à nov. 2004
- ▶ ATER Paris VI et UVSQ de sept. 2001 à août 2003
- ▶ Docteur de l'UPMC (Paris VI) — 2001
- ▶ Ingénieur Supélec — 1998

Enseignement

Enseignement à l'UFR SciFA en Licence/Master **EEA** et **Physique** : **Electronique** analogique, Physique des **semi-conducteurs**, Mesure, **instrumentation et informatique**.

292 HTD en 2016/2017 ; **264** HTD en 2015/2016

Sidi OULD SAAD HAMADY

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

Recherche au LMOPS

Semi-conducteurs III-N

→ Thématique

Caractérisation et **Simulation numérique**

→ Applications

Détection UV et **Conversion photovoltaïque**

Projets / Encadrement / Bibliométrie

Semi-conducteurs III-N

→ Participation à ou direction de **10 projets financés**

→ Co-encadrement de **4 thèses** (dont une en cours)

→ Encadrement et co-encadrement de **9 stages de Master**

→ Publications : **30** articles, **39** conférences internationales, **13** conférences nationales, **1** logiciel et **2** enveloppes Soleau

Propriétés

- ▶ Bandgap de 0.7 eV (InN) à 6.2 eV (AlN)
- ▶ Résistance aux conditions extrêmes (T, rayonnements)

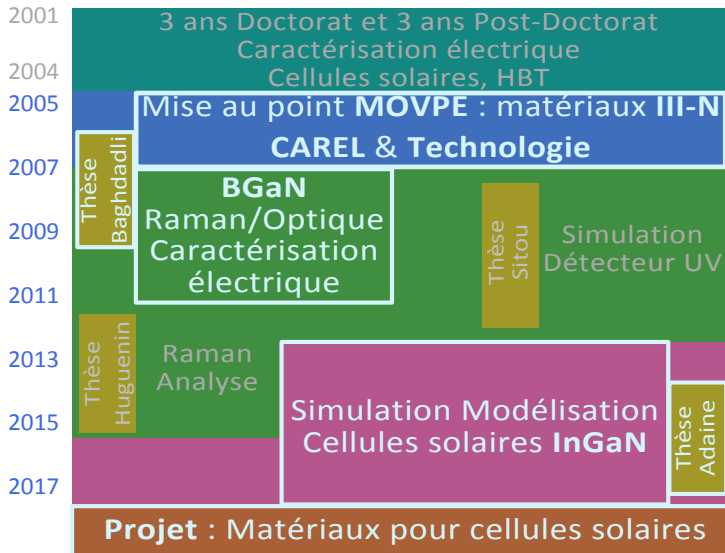
Optoélectronique

- ▶ **Percée bleue : Diodes électroluminescentes, Lasers**
- ▶ Détecteurs UV
- ▶ Cellules solaires : encore en amont

Verrous

Défauts, Épitaxie sur substrats désaccordés, **Séparation de phase**, **Polarisations** piézoélectrique et spontanée, Conduction résiduelle, **Dopage P**, **Éléments rares**

Semi-conducteurs III-N



Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

B GaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

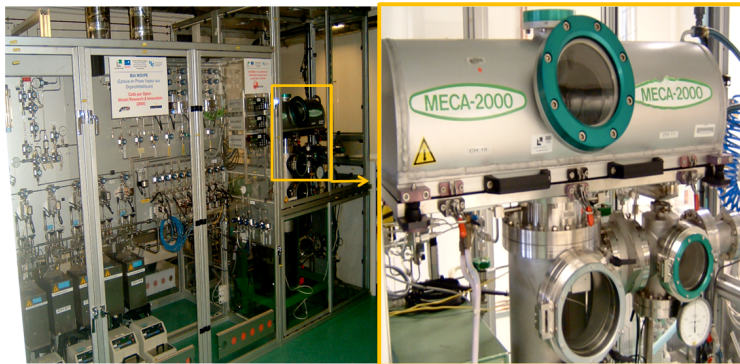
Mise au point MOVPE

Bâti cédé par Alcatel Opto+ au LMOPS, installé en 2004/2005

Conçu et fabriqué à France Télécom dans les années 80^{1 2}

Reconfiguré au LMOPS pour élaboration de **matériaux III-N**

Phase de mise au point ← **Caractérisations**



¹A Mircea, French Patent Appl. 84.10154, 1984.

²A Mircea, R Mellet, B Rose, et al., *Journal of Crystal Growth*, vol. 77, no. 1-3, pp. 340-346, 1986.

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

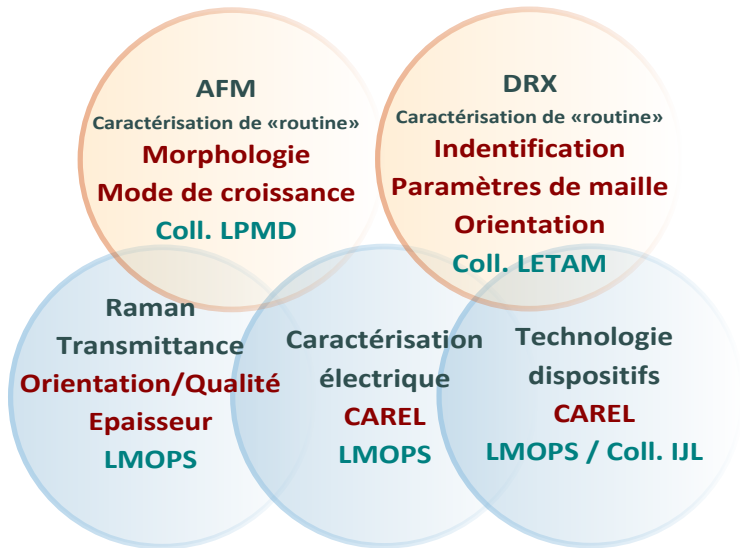
Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

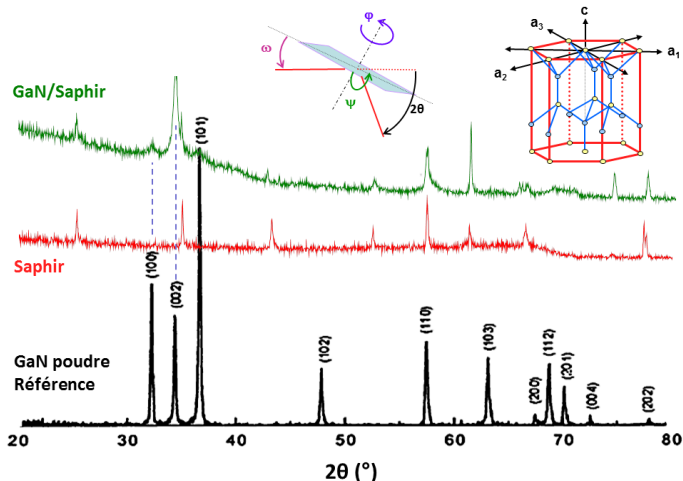
Projet

Mise au point MOVPE



Mise au point MOVPE

Spectre **DRX** (Collaboration LETAM) du deuxième échantillon élaboré dans le bâti MOVPE du LMOPS (premier caractérisé)



GaN poudre : Kumar et al., *Materials Chemistry and Physics* 77 (2003)

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

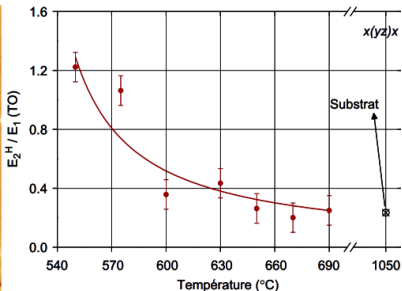
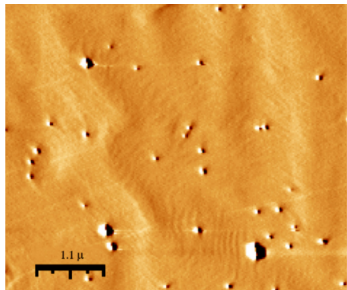
Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

Mise au point MOVPE

Température : Image **AFM** et évolution du rapport d'intensité entre deux pics **Raman** (E_2^h et E_1^{TO})³



Précurseurs : TMGa et DMHy

³S Gautier, C Sartel, S Ould Saad Hamady, *et al.*, *Journal of Crystal Growth*, vol. 298, pp. 428–432, 2007.

Conception et montage de la plateforme CAREL

Objectif : plateforme complète pour caractérisation électrique de routine (\iff élaboration) et études fondamentales

Caractéristiques de CAREL

- ▶ **Fiabilité** et **précision**, procédures normalisées NIST
- ▶ **Évolutivité** \rightarrow nouveaux matériaux
- ▶ **Simplicité** d'utilisation \rightarrow accessible stagiaires, doctorants, chercheurs non spécialistes
- ▶ **Coût** maîtrisé \rightarrow montage bancs et développement logiciel en interne, prix négociés

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

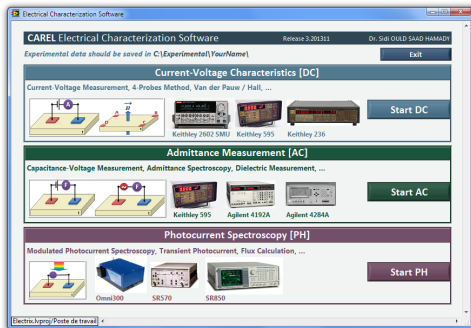
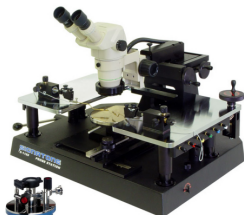
Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

Conception et montage de la plateforme CAREL

Station de mesures sous pointes, Effet Hall / van der Pauw, Mesures C-V-T, Spectroscopie d'admittance, Photocourant modulé (de 300 nm à 2000 nm), Logiciels de contrôle



Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

Technologie → contacts ohmiques et Schottky

Contexte

- ▶ Contacts ohmiques sur III-N → Maîtrise délicate
- ▶ Dispositifs pour caractérisation électrique
- ▶ Composants optoélectroniques

Étapes technologiques

- ▶ Conception de masques pour caractérisation et dispositifs
- ▶ Réalisation des masques de lithographie (Collaboration Institut Jean Lamour / MiNaLor)
- ▶ Procédés de traitement chimique
- ▶ Dépôt de contacts multicouches et recuit rapide

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

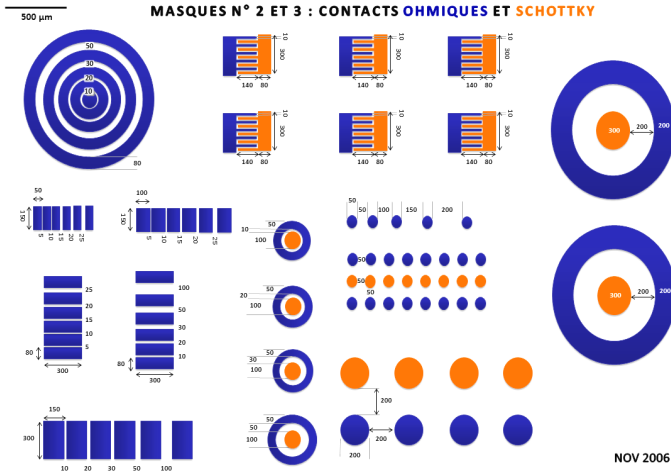
Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

Technologie → contacts ohmiques et Schottky

Conception et réalisation de **masques** de lithographie
Dispositifs **TLM**, Motifs **Schottky** et ohmiques, **Détecteurs**
Toujours utilisés pour détecteurs et caractérisation



Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

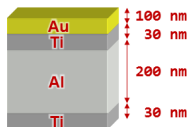
Projet

Technologie → contacts ohmiques et Schottky

Procédés de traitement chimique

Dépôt de contacts multicouches et recuit

Exemple de structures réalisées :



Contact ohmique

Evaporation Ti (30 nm) / Al (200 nm) / Ti (30 nm) / Au (100 nm)

RTA : 600 °C à 900 °C pendant 30 sec. à 2 min. sous atmosphère N₂



Contact ohmique

Evaporation Ti (20 nm à 30 nm) / Al (100 nm à 120 nm)

RTA :

- 600 °C pendant 2 minutes sous atmosphère N₂
- 900 °C pendant 30 secondes sous atmosphère N₂

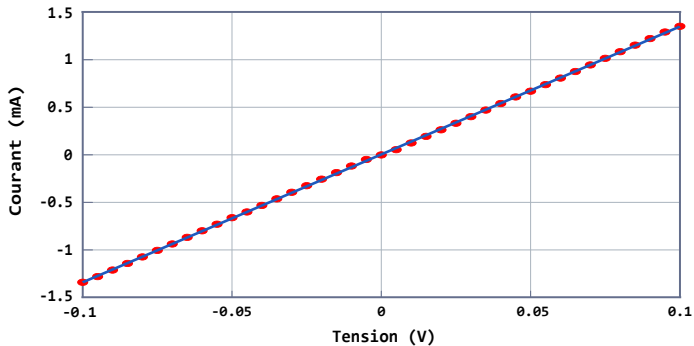


Contact Schottky

Evaporation Pt (100 nm)

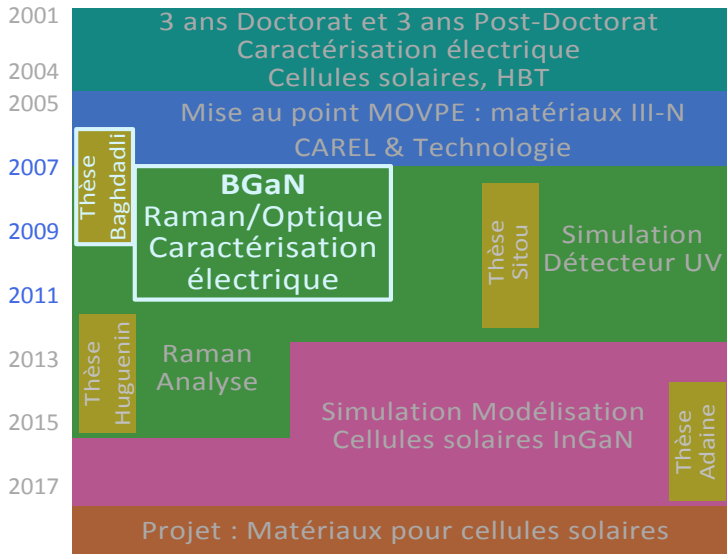
Technologie → contacts ohmiques et Schottky

Ohmicité des contacts sur GaN : résistance spécifique entre $10^{-4} \Omega\text{cm}^2$ et $10^{-5} \Omega\text{cm}^2$ → suffisante pour réalisation de diodes Schottky (contact ohmique et contact Schottky) ⁴



⁴A Ahaitouf, H Srour, S Ould Saad Hamady, *et al.*, *Thin Solid Films*, vol. 522, pp. 345–351, 2012.

Semi-conducteur BGaN pour détecteurs UV



Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

B GaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

BGaN : Contexte

BGaN : Problématique

Objectif premier : accord de maille de GaN sur SiC et AlN

→ sur AlN : 8 % de bore

→ sur SiC : 17 % de bore

BGaN : Etat de l'art à l'époque (2005-2006)

Équipe de Kohgakuin Univ. (Japon)⁵ : $B_{0.01}Ga_{0.99}N/SiC$

BGaN : Verrou

Gap de miscibilité **2.8 %** — 99.5 %⁶

→ Développement de technologie d'élaboration innovante

→ Étude du BGaN avec moins de 2 % de bore

⁵T Honda, M Shibata, M Kurimoto, *et al.*, *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 39, no. 4S, p. 2389, 2000.

⁶L Teles, L Scolfaro, J Leite, *et al.*, *Applied Physics Letters*, vol. 80, no. 7, pp. 1177–1179, 2002.

Encadrements

Doctorats

- M. Baghdadli en caractérisation (oct. 2006 – juil. 2009)
- M. Boumba Sitou en simulation (nov. 2007 – mar. 2012)

Stages

- M. Doulache (2011)
- M^{lle} Boucherfa (2008)
- M. Baghdadli (2006)
- M^{lle} Bouchaour (2006)
- M. Elmoussaouy (2005)

Projets

- PEPS CNRS 2008 – 2009
- Région Lorraine 2006 – 2007 et 2009 – 2010
- ANR GABORE 2007 – 2010

BGaN : Caractérisation structurale et électrique

BGaN élaboré par MOVPE au laboratoire sur **AlN/Saphir**

- Moins de 2 % de bore
- Épaisseurs typiques entre 600 *nm* et 700 *nm*
- BGaN wurtzite

Plus de 2 % de bore

- Séparation de phase GaN — BN
- Élaboration de super-réseaux, mais autres verrous

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

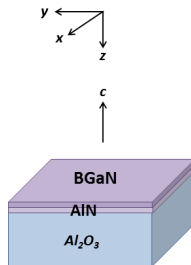
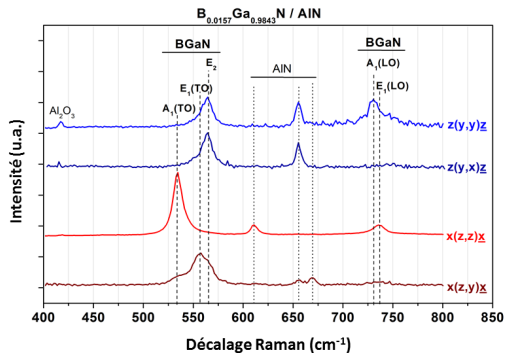
Perspectives

Projet

BGaN : Caractérisation structurale

Orientation des couches de BGaN/AlN/Saphir⁷

Exemple : Spectres Raman BGaN avec 1.57 % de bore :



BGaN orienté selon c mais aussi relaxation des règles

⁷S Ould Saad Hamady, T Baghdadi, S Gautier, et al., *Physica Status Solidi (c)*, vol. 5, no. 9, pp. 3051–3053, 2008.

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE
Plateforme CAREL
Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement
Caractérisations structurale
et électrique
Corrélations
Dispositifs/Perspectives

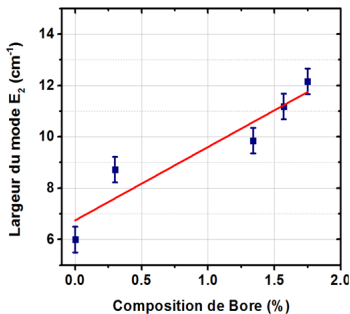
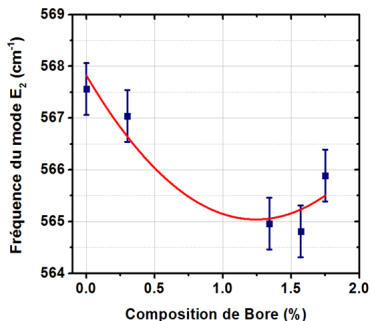
InGaN

Contexte/Encadrement
Optimisation multivariée
Cellules solaires Schottky
Cellules solaires à
multijonction
Perspectives

Projet

BGaN : Caractérisation structurale

Cartographie Raman \rightarrow homogénéité, contraintes^{8 9}



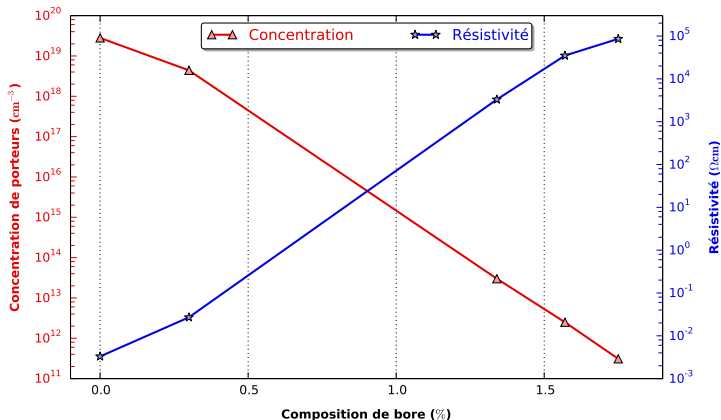
Couches homogènes ($\approx 1\mu\text{m}$) **mais** désordre d'alliage

⁸S Ould Saad Hamady, N Dupuis, J Décobert, *et al.*, *Journal of Crystal Growth*, vol. 310, no. 23, pp. 4741–4746, 2008.

⁹W Goh, J Martin, S Ould Saad Hamady, *et al.*, *Physica Status Solidi (c)*, vol. 6, no. S2, 2009.

BGaN : Caractérisation électrique

Mesures de résistivité



Augmentation drastique de ρ avec le bore

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

Évolution de la résistivité de BGaN en fonction de la composition de bore

Modélisation de la variation de la résistivité avec la température

→ Mécanismes physiques¹⁰ :

- ▶ L'incorporation du bore agit sur l'incorporation d'impuretés résiduelles (oxygène, silicium)
- ▶ Formation de complexes qui induisent une augmentation de l'énergie d'activation des impuretés résiduelles
- ▶ **Niveau profond accepteur qui compense les donneurs résiduels (i.e. compensation par le Carbone dans GaN¹¹)**
- ▶ **Modifications structurales, augmentation de la densité de défauts étendus**

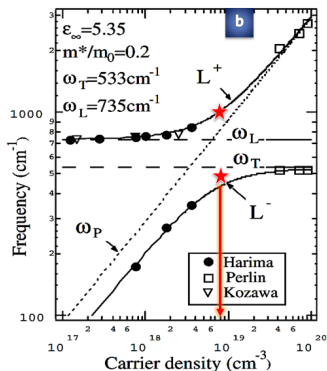
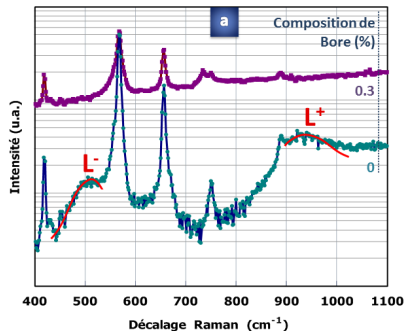
¹⁰T Baghdadli, S Ould Saad Hamady, S Gautier, *et al.*, *Physica Status Solidi (c)*, vol. 6, no. S2, 2009.

¹¹C Hwang, M Schurman, W Mayo, *et al.*, *Journal of Electronic Materials*, vol. 26, no. 3, pp. 243–251, 1997.

Corrélation entre propriétés électriques et Raman

Mode LO dans les matériaux III-N : couplage phonon-plasmon (LOPC)

Branches L^- et L^+ de B GaN



Valeur LOPC : $N \approx 8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

Valeur Hall : $N = 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE
Plateforme CAREL
Technologie

B GaN

Contexte/Encadrement
Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations
Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement
Optimisation multivariée
Cellules solaires Schottky
Cellules solaires à
multijonction
Perspectives

Projet

Corrélation entre propriétés électriques et Raman

Mode LO dans les matériaux III-N : couplage phonon-plasmon (LOPC)

Concentration de porteurs par LOPC :

Domaine de valeurs limité

Forcément corrélée avec et **calibrée par Hall**

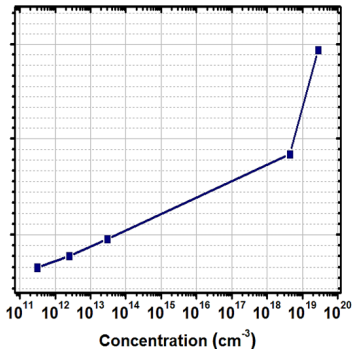
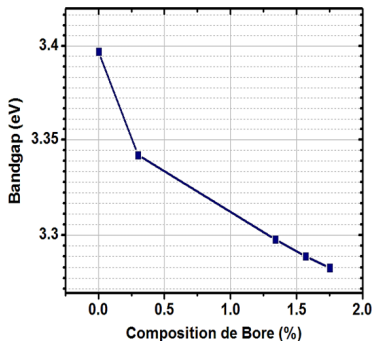
Une fois calibrée et dans les limites du domaine de validité :

Cartographie (X, Y voire Z) à l'échelle micrométrique

Inhomogénéité du dopage voire profil

Corrélation entre propriétés électriques et Transmittance

Evolution du bandgap du BGaN avec le bore



Blueshift (avec concentration de porteurs) → effet Burstein–Moss
→ pas de fort bowing d'alliage dans BGaN ← Corrélations

Conséquences de la découverte de la modulation de la conductivité du B GaN à $< 2\%$ de bore :

→ **Contrôler la résistivité du GaN vs Dopage résiduel**

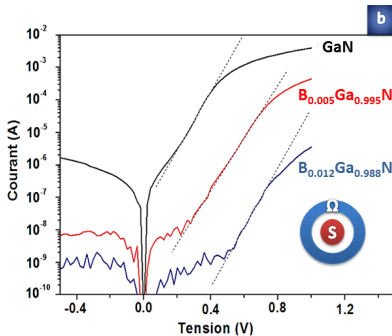
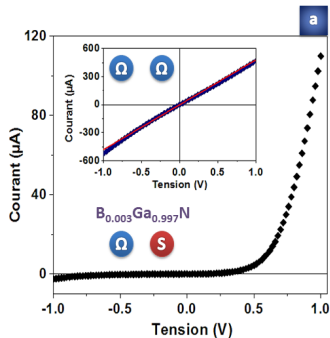
→ Applications possibles :

→ Couche tampon HEMT AlGaIn/GaN
ANR GABORE
Projets GeorgiaTech Lorraine

→ **Couche active détecteurs UV**
Projet PEPS CNRS

BGaN : Dispositifs

Caractéristique courant-tension de **diodes Schottky coplanaires sur BGaN** avec contacts ohmiques Ω en Ti/Al/Ti/Au et contacts Schottky S en Pt



Modélisation des caractéristiques I-V expérimentales : I_S des diodes Schottky diminue avec la composition de bore, de $4 \times 10^{-8} A$ à $5 \times 10^{-14} A$ → **sensibilité détection UV**

BGaN : Dispositifs

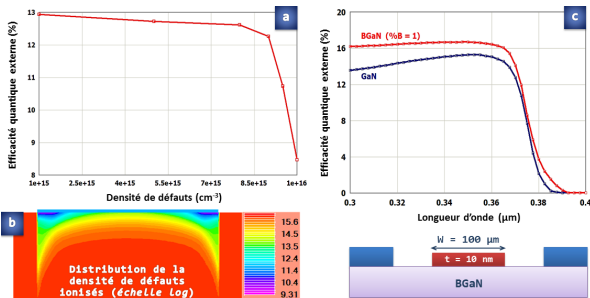
Potentiel du BGaN pour les détecteurs UV :

- ▶ Le courant de saturation inverse I_S diminue avec la composition de bore → **meilleure sensibilité**
- ▶ Gap du BGaN, adapté à la détection UV solar blind
- ▶ Résistance du BGaN aux condition extrêmes (température et radiations)

mais densité de défauts dans BGaN élevée pour la réalisation de détecteurs UV → **simulation numérique pour quantifier l'impact des défauts**

Simulation numérique : quantifier l'effet des défauts

Impact des défauts sur l'EQE d'un détecteur BGaN ¹²



→ **Travail d'élaboration** pour optimiser les couches de BGaN pour la détection UV → réalisation de détecteurs UV à super-réseaux *mais* élaboration complexe et peu maîtrisée

¹²S Ould Saad Hamady, *Physica Status Solidi (c)*, vol. 9, no. 3-4, pp. 1099–1104, 2012.

BGaN : Perspectives

BGaN élaboré par MOVPE, avec 2.9 % et 5.5 % de bore, Lituanie^{13 14}

BGaN élaboré par MBE, avec 3.0 % de bore (sans sép. de phase) et 5.3 % de bore (avec sép. de phase), UCSB¹⁵

→ La limite théorique de miscibilité GaN↔BN de 2.8 % peut être repoussée ⇔ développement de procédés d'**élaboration** innovants pour :

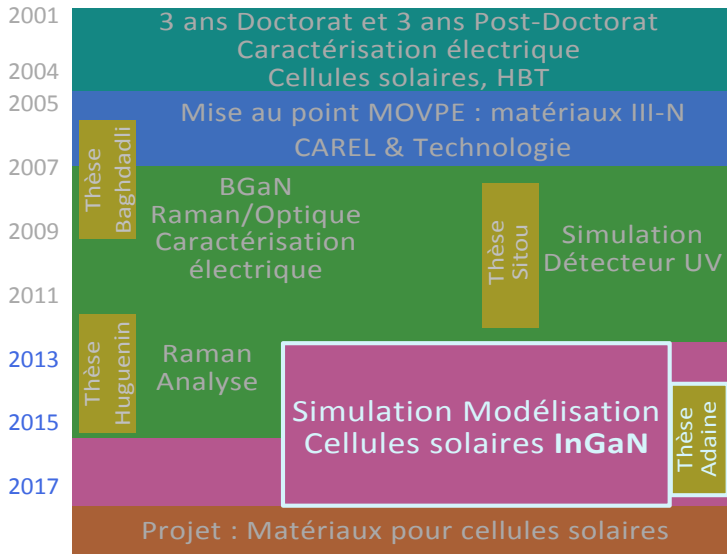
- réduire les **défauts** structuraux : **défi**
- procédés **contacts** pour **bore au-delà de 2 %** : **à faire**
- maîtriser le **dopage P** (détecteurs PIN) : **à faire**

¹³T Malinauskas, A Kadys, S Stanionytė, *et al.*, *Physica Status Solidi (b)*, vol. 252, no. 5, pp. 1138–1141, 2015.

¹⁴J Jurkevičius, J Mickevičius, A Kadys, *et al.*, *Physica B: Condensed Matter*, vol. 492, pp. 23–26, 2016.

¹⁵B Bonef, R Cramer, F Wu, *et al.*, *Microscopy and Microanalysis*, vol. 23, no. S1, pp. 668–669, 2017.

Semi-conducteur InGaN pour cellules solaires



Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGAN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

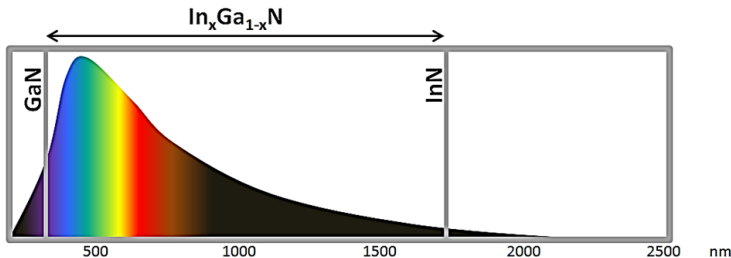
Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

InGaN : Contexte

Potentiel InGaN : absorption très élevée ; résistance hautes températures et radiations ; Gap modulable IR → UV



mais meilleurs rendements actuels moins de **3 %** :

Verrous : Défauts, Épaisseur à composition d'In élevée ; Dopage P ; Contacts ; Polarisation piézoélectrique et spontanée

→ **recherche amont** : design et simulation, élaboration, technologie, caractérisation

Simulation numérique de cellules solaires InGaN

Objectifs

- ▶ Étude des cellules solaires InGaN **vs** Verrous : Qualité, Épaisseur à composition d'In élevée ; Dopage P ; Contacts ; Polarisation piézoélectrique et spontanée
- ▶ Conception de structures innovantes **vs** Contraintes technologiques actuelles ou accessibles

Contraintes

- ▶ Utilisation de modèles physiques empiriques
- ▶ Méthodes d'optimisation mathématique rigoureuses : une première

Encadrements

Doctorat

M. Adaine (2014 — début 2018)

Stages

M. Manamanni (2016)

M^{lle} Mezouari (2017)

Projet

Université de Lorraine, SLALOM (2017)

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

InGaN : Optimisation multivariée

Optimisation de cellules solaires : état actuel :

Définir un ensemble de paramètres $\{P_1, P_1, \dots, P_n\}$: composition, taux de dopage, épaisseurs, etc.

Optimisation univariée (analyse paramétrique)

Faire **varier un paramètre** P_i dans un intervalle $[P_i^{\min}, P_i^{\max}]$ avec un nombre m d'échantillons, et en maintenant tous les **autres paramètres constants** \rightarrow valeur optimale $P_i^{\text{optimal}} \rightarrow$ Itérer avec $m \times n$ échantillons au total

Très longue et interdépendance non prise en compte

Optimisation multivariée par la force brute

Parcourir l'espace à n -dimensions avec un nombre d'échantillons m dans chacun des n intervalles $[P_i^{\min}, P_i^{\max}]$, $1 \leq i \leq n \rightarrow m^n$ échantillons au total

Infaisable en pratique

InGaN : Optimisation multivariée

Optimisation de cellules solaires : nouvelle méthode :
Durées vs autres méthodes : heures vs semaines

Optimisation multivariée par algorithmes mathématiques

- ▶ SLSQP (Sequential Least Squares Programming) : méthode itérative utilisant la méthode de Newton
- ▶ L-BFGS-B (Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno) : méthode quasi-Newton
- ▶ Fonction à optimiser : $\eta\{P_i\} \rightarrow$ Modèle dérive-diffusion

Logiciel SLALOM

- ▶ Open-source SoLAr cell multivariate OptiMizer : Méthodes classiques **et** nouvelle méthode ; Client-serveur, $I(V)$, Réponse spectrale, etc.
- ▶ Logiciel évolutif, modulaire, performant et libre

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

InGaN : Cellules solaires sans dopage P

Dopage P : verrou majeur pour les matériaux III-N et encore plus pour l'InGaN → couche P remplacée par un contact Schottky

Cellules solaires Schottky : état de l'art

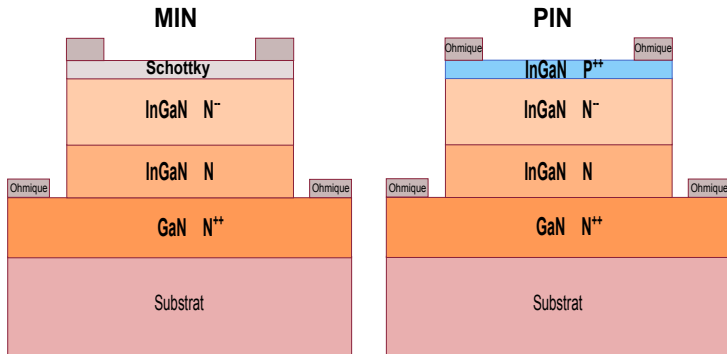
- ▶ PbS¹⁶ : **5.2 %**, Schottky en LiF/Al, ohmique en ITO
- ▶ Schottky/silicium : jusqu'à **10 %** de rendement
- ▶ **Schottky/InGaN** : uniquement trois publications expérimentales et pas d'étude en simulation et optimisation avant notre 1^{er} article Schottky :
 $V_{OC} = 0.4 \text{ V}$ et $J_{SC} = 0.019 \text{ mA/cm}^2$ ¹⁷
→ faisabilité mais encore **très en amont**

¹⁶C Pilliego, L Protesescu, S Bisri, *et al.*, *Energy & Environmental Science*, vol. 6, no. 10, pp. 3054–3059, 2013.

¹⁷K. Chern, N. Allen, T. Ciarkowski, *et al.*, *Materials Science in Semiconductor Processing*, vol. 55, pp. 2–6, 2016.

InGaN : Cellules solaires sans dopage P

Structures Schottky/InGaN et nouvelle structure **MIN** : logiciel SLALOM et paramètres InGaN expérimentaux



InGaN : Cellules solaires sans dopage P

Structures Schottky/InGaN et nouvelle structure **MIN** : logiciel SLALOM et paramètres InGaN expérimentaux ¹⁸ ¹⁹ ²⁰

	$L_n(\mu\text{m})$	$N_d(\text{cm}^{-3})$	$W_f(\text{eV})$	x	$\eta(\%)$
MIN	0.83 [0.10 ; 1.00]	3.6×10^{17} [1.8×10^{16} ; 1.0×10^{19}]	6.30 [6.11 ; 6.30]	0.60 [0.48 ; 0.72]	19.8
Schottky	0.86 [0.53 ; 1.00]	6.5×10^{16} [1.0×10^{16} ; 3.0×10^{17}]	6.30 [6.15 ; 6.30]	0.56 [0.50 ; 0.72]	18.2

- ▶ **Rendement** Schottky, MIN \geq PN, PIN
- ▶ Tolérances MIN les plus larges : **robustesse**
- ▶ **mais** quid de la **faisabilité actuelle** et des **défauts** ?

¹⁸A Adaine, S Ould Saad Hamady, and N Fressengeas, *Superlattices and Microstructures*, vol. 96, pp. 121–133, 2016.

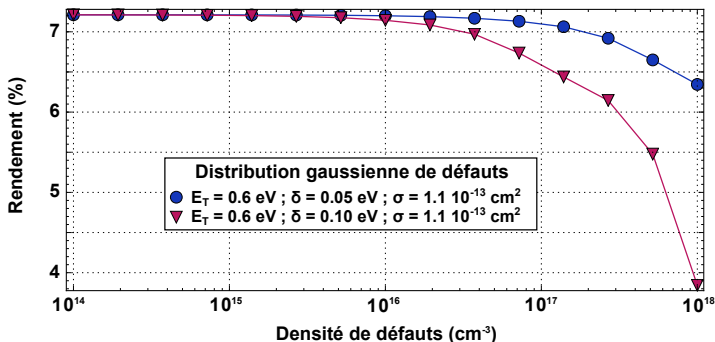
¹⁹S Ould Saad Hamady, A Adaine, and N Fressengeas, *Materials Science in Semiconductor Processing*, vol. 41, pp. 219–225, 2016.

²⁰A Adaine, S Ould Saad Hamady, and N Fressengeas, *International Nanotechnology Conference, Paris, France.*, 2016.

InGaN : Cellules solaires sans dopage P

Rendement en fonction W_f Pt pour MIN avec **contraintes technologiques actuelles** : composition limitée à 22 %, épaisseur à 400 nm, etc.

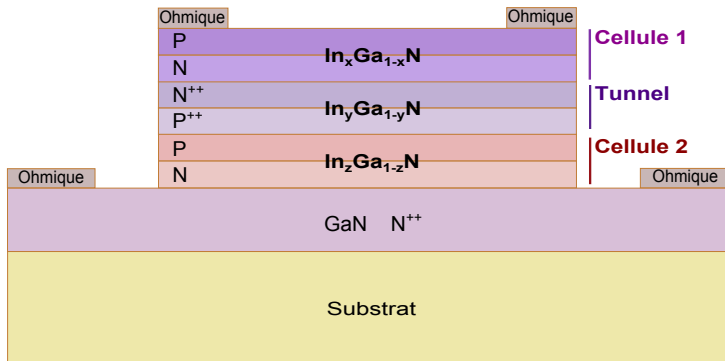
W_f (eV) Pt	6.30	6.10	5.93	5.65
η (%)	7.25	6.15	5.22	3.70



InGaN : Cellules solaires à multijonction

Structures simples (PN, PIN, Schottky, MIN) : rendement (avec données empiriques et modèles précis) limité à **20 %**

→ **Structures complexes à multijonction**



InGaN : Cellules solaires à multijonction

Étude de structures InGaN à **double jonction** ²¹ ²² ²³ :
logiciel SLALOM avec 11 à 16 paramètres

Rendement **24.4 %**, $J_{SC} = 12.92 \text{ mA/cm}^2$, $V_{OC} = 2.287 \text{ V}$
et $FF = 82.55 \%$

Pour la première fois : Jonction Tunnel simulée, polarisations piézo et spontanée, défauts

Une précédente étude : 35 % (pas de paramètres empiriques,
pas de Tunnel, pas de polarisations)

Quid de polarisations plus grandes ?

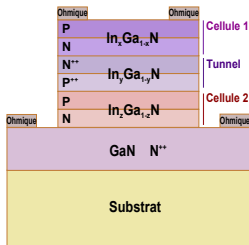
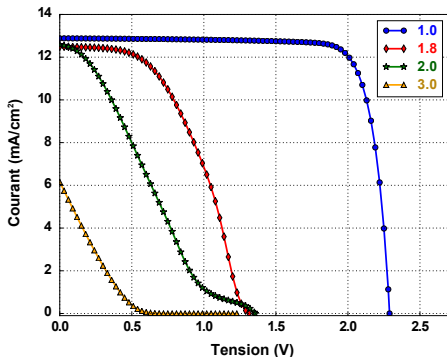
²¹A Adaine, S Ould Saad Hamady, and N Fressengeas, *Superlattices and Microstructures*, vol. 107, pp. 267–277, 2017.

²²A Adaine, S Ould Saad Hamady, and N Fressengeas, *12th International Conference on Nitride Semiconductors - July 24-28, 2017 - Strasbourg, France, 2017*.

²³A Adaine, S Ould Saad Hamady, and N Fressengeas, *Compound Semiconductor Week - May 14-18, 2017 - Berlin, Germany, 2017*.

InGaN : Cellules solaires à multijonction

Impact des polarisations spontanée et piézoélectrique



Polarisation spontanée et piézoélectrique → shunte la jonction
Tunnel → effet de seuil : décroissance de V_{OC} puis de J_{SC}
→ **annihile l'effet de la Tunnel.**

Défi majeur

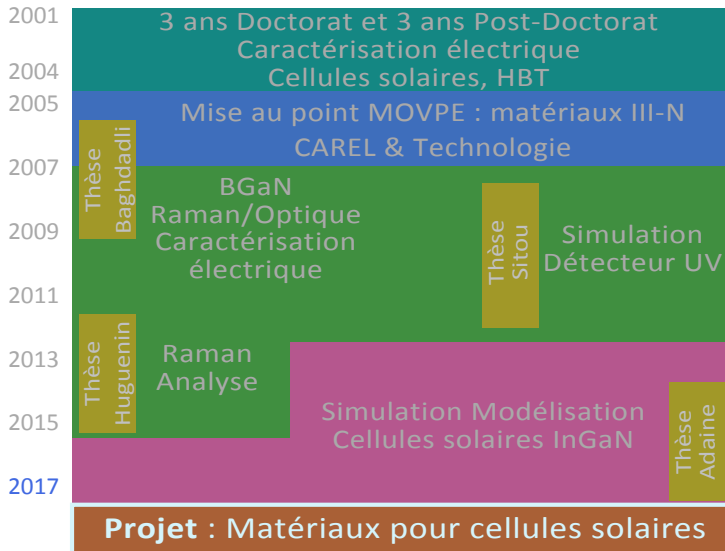
Élaboration de couches d'InGaN avec une composition élevée d'indium, de qualité et épaisses
Perspectives encourageantes²⁴ **mais** à long terme

Voies possibles

- ▶ Structures à super-réseaux GaN/InGaN
- ▶ Structures à puits quantiques : classique pour les LEDs mais quid des cellules solaires ? Rendement record 2 %
- ▶ Structures à boîtes quantiques : seuil d'absorption modulable par taille des boîtes, à explorer
- ▶ **Structures à miroir HCG : notre projet**

²⁴F Yang, Y Zhang, X Han, *et al.*, *Superlattices and Microstructures*, vol. 91, pp. 259–268, 2016.

Projet scientifique : HECTOR



Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

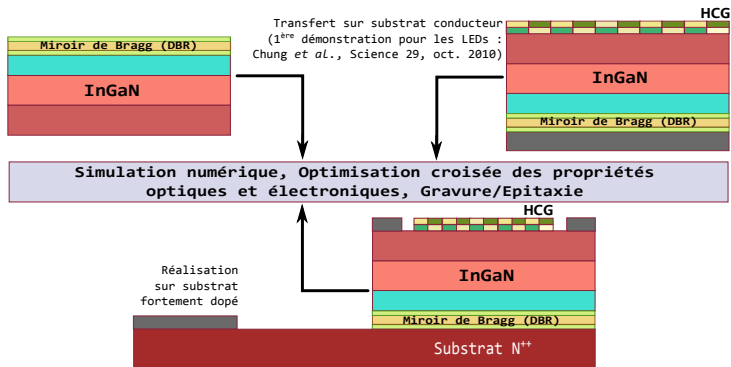
Perspectives

Projet

Projet scientifique : HECTOR

Volet 1 : Miroir HCG pour diminuer l'épaisseur nécessaire d'InGaN par effet Fabry Péro

Deux voies : miroir de Bragg sur cellule InGaN et transfert sur substrat conducteur ; ou cellule élaborée sur miroir de Bragg ; puis gravure du miroir HCG



→ 2 EC, Thèse 2018, Stages Master, Valorisation/Collaboration

Simulation et
Caractérisation de
Semi-conducteurs
III-N

Sidi HAMADY

Soutenance HDR
1^{er} décembre 2017

Présentation

MOVPE / CAREL

Mise au point MOVPE

Plateforme CAREL

Technologie

BGaN

Contexte/Encadrement

Caractérisations structurale
et électrique

Corrélations

Dispositifs/Perspectives

InGaN

Contexte/Encadrement

Optimisation multivariée

Cellules solaires Schottky

Cellules solaires à
multijonction

Perspectives

Projet

Projet scientifique : HECTOR

Volet 2 : Cellules solaires à éléments abondants

Indium : élément rare : épuisement des réserves en 2035²⁵

Matériaux alternatifs : pré-requis : abondants, absorption très élevée, résistance aux conditions extrêmes, gap modulable IR – UV, techniques d'élaboration bas coût.

Compétences variées et complémentaires : Caractérisations électrique/structurale, Simulation numérique, Physique des semi-conducteurs, Technologie de réalisation de composants.

Montage d'une plateforme d'élaboration bas coût : maîtrise de la chaîne et développement de la thématique semi-conducteurs du LMOPS → 4 EC, 1 ATER, Thèse, Stages Master

²⁵M Lokanc, R Eggert, and M Redlinger, National Renewable Energy Lab.(NREL), Golden, CO (United States), Tech. Rep., 2015.

Remerciements

- ▶ Membres du jury
- ▶ Collègues du LMOPS pour leur soutien
- ▶ Chercheurs et étudiants encadrés
- ▶ Équipe administrative et technique

Merci de votre attention

Explication
Dialogue
Questions
Recherche
Projet Discussion
Information
Précisions

- ▶ **M. Abdouwahab Adaine**, 09/2014 – 02/2018, 50%, avec Nicolas Fressengeas, simulation numérique et optimisation de de cellules solaires à base de semi-conducteurs III-N
- ▶ **M. Joris Huguenin**, 10/2012 – 12/2015, 50%, avec Patrice Bourson, application de la spectroscopie Raman à l'analyse de la pollution de l'eau
- ▶ **M. D'Havh Boumba Sitou**, 11/2007 – 03/2012, 50%, avec Nicolas Fressengeas, utilisation d'automates cellulaires pour la résolution des modèles de dérive-diffusion dans les semi-conducteurs
- ▶ **M. Tewfik Baghdadli**, 09/2006 – 07/2009, $\approx 100\%$, caractérisation électrique de semi-conducteurs III-N

Stages de Master encadrés

- ▶ **M^{lle} Farah Jammal**, de 03 à 07/2017, 50%, avec Michel Aillerie
- ▶ **M. Karim Manamanni**, de 01 à 03/2016, 50%, avec Nicolas Fressengeas
- ▶ **M^{lle} Rania Mezouari**, de 01 à 03/2016, 50%, avec Nicolas Fressengeas
- ▶ **M^{lle} Asma Said**, de 09 à 11/2013, 40%, avec Nicolas Fressengeas (40%) et Jean-Paul Salvestrini (20%)
- ▶ **M. Mohamed Rafik Doulache**, de 02 à 07/2011, 100%
- ▶ **M^{lle} Yasmina Boucherfa**, de 04 à 07/2008, 100%
- ▶ **M^{lle} Mama Bouchaour**, de 04 à 06/2006, à 50%, avec Nabila Maloufi
- ▶ **M. Tewfik Baghdadli**, de 04 à 06/2006, à 100%
- ▶ **M. Abdelkhalek Elmoussaouy**, de 02 à 07/2005, à \approx 100%

Projets financés

- ▶ **SLALOM (SoLAr ceLI multivariate OptiMizer)**, 2017 Université de Lorraine
- ▶ **Porphyrines**, 2013-2015 Région Lorraine
- ▶ **BioCapTech**, 2012-2015 Région Lorraine
- ▶ **NewPVonGlass**, 2008-2011 ANR
- ▶ **SSPG**, 2010 Région Lorraine
- ▶ **Photodétecteur UV**, 2008-2009 PEPS CNRS
- ▶ **Photocourant modulé**, 2009-2010 Région Lorraine
- ▶ **GABORE**, 2007-2010 ANR
- ▶ **Thèse de doctorat**, 2007-2010 Région Lorraine
- ▶ **Subvention installation**, 2005 Région Lorraine

Annexes

Doctorats encadrés

Stages Master

Projets financés

Collaborations

Responsabilités

Publications

Liste des collaborations

- ▶ **Unité Mixte Internationale CNRS / GeorgiaTech**,
membre associé de 2006 à 2013
- ▶ **Université de Tlemcen (Algérie)**
- ▶ **Centre Universitaire de Relizane (Algérie)**
- ▶ **Faculté des Sciences de Monastir (Tunisie)**
- ▶ **Faculté des Sciences et Techniques de Fès (Maroc)**
- ▶ **Institut Jean Lamour / centre de compétences
MiNaLor – Nancy**
- ▶ **Laboratoire LETAM – Metz**
- ▶ **LCP-A2MC – Metz**

Responsabilités administratives et expertise

- ▶ Responsable parcours type POM, Master PAIP 2018-2022
- ▶ Participation maquette licences Physique et EEA 2018-2022
- ▶ Membre élu du Conseil LMOPS depuis janvier 2017
- ▶ Rapporteur commissions avancement MCF HC
- ▶ Reviewer pour *Optical and Quantum Electronics*, *Journal of Photonics for Energy*, *Archives of Metallurgy and Materials*, *Journal of Nanophotonics*, etc.
- ▶ Membre élu du Conseil de la Formation 2012-2017
- ▶ Participation à la maquette de la licence EEA 2013-2017
- ▶ Correspondant formation du laboratoire de 2007 à 2009
- ▶ En charge des appels d'offre CNRS du laboratoire de 2006 à 2008
- ▶ Organisateur de la journée des métiers 2006 SciFA
- ▶ Membre de la commission communication SciFA 2006-2007

Publications

- ▶ 30 articles de revues internationales à comité de lecture
- ▶ 39 conférences internationales
- ▶ 13 conférences nationales
- ▶ 1 logiciel
- ▶ 2 enveloppes Soleau
- ▶ 1 mémoire de thèse de Doctorat
- ▶ 1 mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches

Annexes

Doctorats encadrés

Stages Master

Projets financés

Collaborations

Responsabilités

Publications