

Pérovskites chalcogénures ou oxysulfures, une nouvelle classe de matériaux pour le photovoltaïque ?

T. Fix¹, S. Raissi¹, D. Muller¹, C. Bouillet², D. Preziosi², A. Slaoui¹

1 – Laboratoire ICube, CNRS et Université de Strasbourg, Strasbourg, France

2 – Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg, CNRS et Université de Strasbourg, Strasbourg, France

*tfix@unistra.fr

Les pérovskites sont des structures basées sur la formule ABX_3 . La découverte des cellules solaires à base de pérovskites halogénées ($X=Cl, Br, I$) a profondément marqué la communauté du photovoltaïque dans ces dernières années, avec des rendements de conversion rivalisant avec les technologies bien établies à base de silicium. Cependant il reste des défis majeurs comme la toxicité, la stabilité, et la taille des cellules, bien que les progrès soient rapides dans ce domaine. Les pérovskites oxydes de forme ABO_3 ne sont pas en reste et présentent des propriétés exceptionnelles telles que la supraconductivité, le magnétisme, la (multi)ferroïcité et les gaz d'électrons 2D. Leur largeur de bande interdite est souvent trop élevée pour des applications photovoltaïques. Une autre classe de matériaux beaucoup moins connue est les pérovskites chalcogénures ou oxysulfures, par exemple comme ABS_3 ou $AB(O_xS_{1-x})_3$. La présence de soufre permettrait dans ces matériaux d'abaisser la largeur de bande interdite et d'augmenter la mobilité des porteurs [1].

Ainsi le matériau $CaTiS_3$ est prédit sous sa forme pérovskite avec une largeur de bande interdite de 0,9 eV [2], bien que sa stabilité sous la forme pérovskite soit l'objet de débats [3]. Dans ce travail nous utilisons l'ablation laser pulsé (PLD) pour obtenir des couches minces de $CaTiS_3$ à partir d'une cible de $CaS:TiS_2$ (Figure 1) [4]. En déposant sous vide à une température de 600°C sur des substrats de Al_2O_3 (0001) nous obtenons des films de stœchiométrie $Ca_{1.00}Ti_{1.05}S_{2.48}O_y$ par EDS (Energy-dispersive X-ray spectroscopy) et $Ca_{1.0}Ti_{1.0}S_{2.0}O_{0.7}$ par RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry) (Figure 2). Ceci indique que quand les films sont déposés sous vide à une température de substrat modérée une forte quantité de soufre peut être transférée de la cible vers le film. Bien qu'aucune ségrégation de phase en CaS et TiS_2 ne soit observée, la phase pérovskite $CaTiS_3$ ne peut pas être obtenue. La phase obtenue est plutôt basée sur des interactions de van der Waals avec un comportement de semiconducteur de type n fortement dopé, avec un coefficient d'absorption dans les 10^5 cm^{-1} à 350-2500 nm. Ce travail ouvre la voie vers l'exploration des pérovskites chalcogénures et oxysulfures par PLD, technique qui permet d'obtenir des phases métastables.

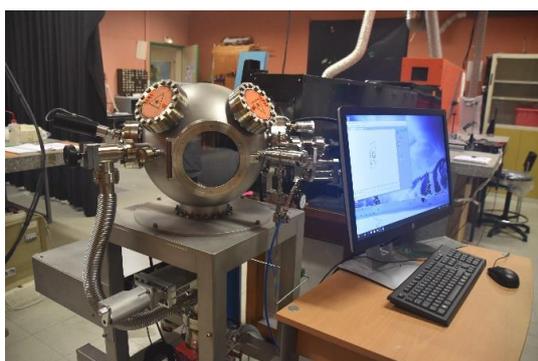


Figure 1 : Bâti de PLD utilisé à ICube

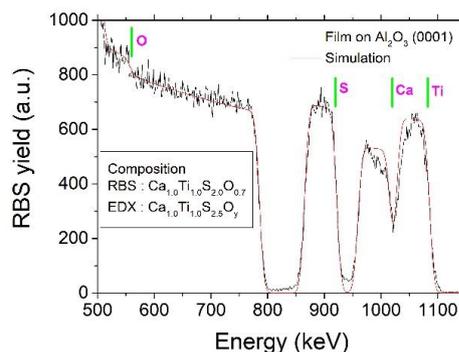


Figure 2 : Spectre RBS d'une couche mince déposée par PLD sur saphir à partir d'une cible de $CaS:TiS_2$.

Références:

- [1] R. Hoye*, J. Hidalgo, R. Jagt, J.-P. Correa-Baena, T. Fix*, J. MacManus-Driscoll*, *Advanced Energy Materials*, 12, 2100499 (2022)
- [2] Y.Y. Sun, M.L. Agiorgousis, P.H. Zhang, S.B. Zhang, *Chalcogenide Perovskites for Photovoltaics*, *Nano Lett.*, 15 (2015) 581-585.
- [3] K.V. Sopiha, C. Comparotto, J.A. Marquez, J.J.S. Scragg, *Chalcogenide Perovskites: Tantalizing Prospects*, *Challenging Materials*, *Advanced Optical Materials*, 10 (2022) 27.
- [4] T. Fix, S. Raissi, D. Muller, C. Bouillet, D. Preziosi, A. Slaoui, *Insights on $CaTiS_3$ films grown by pulsed laser deposition*, *J. Alloys Compd.*, **2023**, 964, 171272.