

Oxysulfures &co, comment booster les oxydes avec du soufre ?

T. Fix¹, D. Stoeffler², Y. Zakaria¹, D. Muller¹, S. Roques¹, A. Dinia², 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 oxydes en couches minces possèdent de nombreuses qualités comme la multifonctionnalité, la stabilité, la versatilité des techniques de dépôt, souvent une faible toxicité etc. Cependant les rendements de conversion de cellules solaires à base d'absorbant oxyde ne dépassent pas les 8 %, comme avec Cu_2O ou $\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$. Ceci est en partie dû au bandgap généralement élevé des oxydes ainsi qu'à des mobilités et longueurs de diffusion des porteurs minoritaires non optimales. Mais les oxydes sont également utilisés dans d'autres applications photovoltaïques comme les oxydes transparents conducteurs (TCO) et de plus en plus les couches d'interface sélectives.

Une solution possible pour améliorer ou modifier les propriétés électroniques des oxydes est d'insérer du soufre partiellement (oxysulfures) ou totalement (chalcogénures) en substitution de l'oxygène. Nous avons utilisé pour cela trois voies, l'implantation ionique, le recuit sous vapeur de soufre, et le transfert de soufre par une cible sous dépôt d'ablation laser pulsé.

Nous montrons par des calculs ab initio et expérimentalement que dans le cas de la pérovskite oxyde SrTiO_3 l'insertion de soufre permet une réduction progressive du bandgap pouvant atteindre quasiment 1 eV.

Ce comportement est reproduit dans d'autres couches minces de pérovskites élaborées par ablation laser pulsé, permettant un ajustement fin et à la demande des niveaux d'énergie des oxydes.

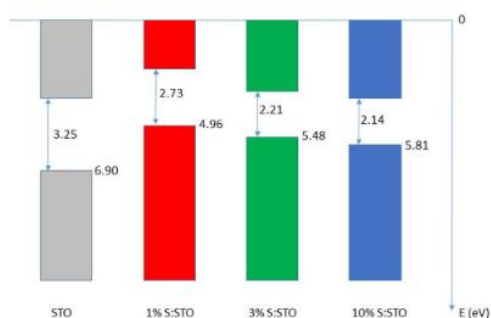


Figure 1 : Niveaux d'énergie de S:SrTiO₃ mesurés à l'ICube



Figure 2 : Implantation ionique dans la plateforme C3Fab d'ICube.

Références:

[1] R. Hoye*, J. Hidalgo, R. Jagt, J.-P. Correa-Baena, T. Fix*, J. MacManus-Driscoll*, *Advanced Energy Materials*, 12, 2100499 (2022). <http://dx.doi.org/10.1002/aenm.202100499>

[2] 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.*, 964, 171272 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.171272>

[3] T. Fix, Y. Zakaria, D. Stoeffler, D. Muller, A. Dinia, A. Slaoui, Sensitive Bandgap Reduction of SrTiO_3 through Incorporation of Sulfur Using Ion Implantation, *Solar RRL* 8, 2400237 (2024).

<https://doi.org/10.1002/solr.202400237>