

# Spectroscopies de photoémission

## pour l'amélioration des interfaces oxydes/pérovskites

*D. Aureau<sup>1</sup>, J. Hajhemati<sup>1,2</sup>, M. Frégnaux<sup>1</sup>, S. Cacovich<sup>2</sup>, H.-G. Boyen<sup>3</sup>, N. Schneider<sup>2</sup>, P. Schulz<sup>2</sup>*

(1) Institut Lavoisier de Versailles, Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines, U Paris-Saclay, CNRS, UMR 8180, 78035 Versailles Cedex,

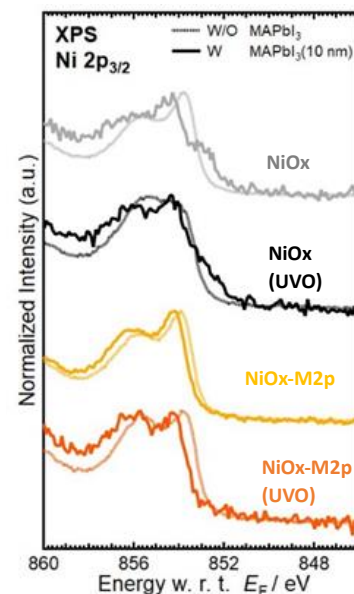
(2) Institut Photovoltaïque d'Ile-de-France, UMR IPVF 9006, CNRS, École Polytechnique, Institut Polytechnique de Paris, 91120 Palaiseau,

(3) Institute for Materials Research (IMO-IMOMEC), Hasselt University, Wetenschapspark 1, 3590 Diepenbeek, Belgium

Dans les multicouches utilisées en tant que cellules solaires, il apparaît naturellement que l'amélioration de ces dispositifs photovoltaïques passe par un contrôle et une maîtrise accrue des différentes interfaces. Ce travail vise à illustrer cette problématique en s'intéressant particulièrement à la physico chimie de la surface de l'oxyde de nickel (NiOx) en contact avec un matériau absorbeur à base de pérovskites métalliques halogénées. L'oxyde de nickel est largement utilisé comme couche de transport de trous (HTL) en raison de sa bande interdite élevée et de sa transparence. Cependant, sa réactivité de surface élevée et la présence de défauts d'interface ont un impact négatif sur les performances du dispositif<sup>[1,2]</sup>. Nous présentons dans cette étude l'influence d'un post-traitement UV-ozone (UVO) du NiOx ainsi que l'utilisation de molécules organiques pour la passivation de surface. Les spectroscopies de photoémission (UPS, XPS et HAXPES) ont été les techniques de choix principales mises en œuvre dans cette étude afin notamment de suivre les évolutions des structures de bande aux interfaces, des compositions chimiques ainsi que les changements de degrés d'oxydation du cation métallique constitutif de l'oxyde.

Il a été mis en évidence que le traitement UVO rendait la surface d'oxyde de nickel plus réactive et modifiait son diagramme de bande énergétique. De plus, comme illustré dans la figure ci-contre, l'étude réalisée a permis de mettre en évidence que la présence de la couche pérovskite au contact de l'oxyde de nickel génère des états réduits (nickel métallique source de défauts pour les dispositifs) qui sont diminués par l'ajout d'une couche organique de MeO-2PACz (M2P) utilisée comme intercalaire. En effet, l'épaulement vers 853 eV (associé aux Ni<sup>0</sup>) n'est plus détecté après greffage des molécules. De plus, l'utilisation de rayons X de différentes énergies a permis de sonder différentes profondeurs au sein des matériaux afin d'estimer les variations de compositions.

Ces résultats de physico-chimie de surface ont également pu être corrélés aux performances des cellules solaires, et ont montré que les améliorations apportées par les couches organiques s'accompagnaient d'augmentations à la fois du  $V_{oc}$  et du  $J_{sc}$ , rendant ce type d'approche très prometteuse pour le futur.



1. A. R. M. Alghamdi, M. Yanagida, Y. Shirai, G. G. Andersson, K. Miyano, *ACS Omega* **2022**, 7, 12147.
2. Y. Guo, J. Ma, H. Wang, F. Ye, L. Xiong, H. Lei, Z. Tan, *Adv. Mater. Interfaces* **2021**, 8, 2100920.