

Etude du mécanisme de formation d'une hétérostructure de pérovskites 2D/3D appliquée pour des cellules photovoltaïques

Thomas Campos ^{*1,2}, Pia Dally ^{2,5}, Stéphanie Gbegnon ², Alexandre Blaizot ², Gaëlle Trippé-Allard ¹, Marion Provost ², Muriel Bouttemy ⁵, Aurélien Duchatelet ^{2,3}, Damien Garrot ⁴, Jean Rousset ^{2,3}, Emmanuelle Deleporte ¹

¹ Laboratoire Lumière, Matière et Interfaces (LuMIn), Université Paris-Saclay, ENS Paris-Saclay, CNRS, CentraleSupélec, Campus d'Orsay, 91405 Orsay, France * thomas.campos@ens-paris-saclay.fr

² Institut Photovoltaïque d'Île-de-France (IPVF), 18 Boulevard Thomas Gobert, 91120 Palaiseau, France

³ EDF R&D, Boulevard Gaspard Monge, 91120 Palaiseau, France

⁴ Groupe d'Etudes de la Matière Condensée (GEMAC), Université Versailles Saint-Quentin en Yvelines, CNRS, 45 avenue des Etats-Unis, 78000 Versailles, France

⁵ Institut Lavoisier de Versailles (ILV), Université Versailles Saint-Quentin en Yvelines, CNRS, 45 avenue des États-Unis, 78000 Versailles, France

Les cellules solaires à base de pérovskite, utilisant les pérovskites 3D comme couche active, ont atteint des rendements de 25,7 % ^[1], se rapprochant de la technologie silicium. Bien que de nombreuses améliorations aient été apportées sur les stabilités intrinsèques et extrinsèques de ce matériau face à une exposition à la lumière, la température, l'oxygène et l'humidité, la stabilité des pérovskites 3D reste encore l'un des enjeux les plus cruciaux afin de développer la commercialisation de cette technologie. ^[2]

De nombreuses approches ont été étudiées afin d'améliorer la stabilité des cellules photovoltaïques à base de pérovskite, avec une attention particulière portée sur les interfaces. ^[3] Dans cette optique, l'utilisation des pérovskites 2D et leur addition aux pérovskites 3D, permettant la formation d'une hétérostructure de pérovskites 2D/3D, est une voie prometteuse pour obtenir des cellules solaires à base pérovskite ^[3] et des cellules tandem silicium-pérovskite ^[4] plus stables et performantes.

Dans ce travail, nous étudions la synthèse par spin-coating d'une hétérostructure de pérovskite 2D/3D en déposant une solution d'isopropanol (IPA) contenant un cation « espaceur », l'iodure de 4-fluorophénéthylammonium (4-FPEAI) sur une pérovskite 3D triple-cation déjà formée. Ce procédé conduit à la formation d'une fine couche de pérovskite 2D cristallisée à la surface de la couche active de pérovskite 3D.

En comparaison de l'utilisation d'une pérovskite 3D seule, une amélioration du rendement et de la stabilité des cellules photovoltaïques est obtenue via l'ajout de pérovskite 2D et formation de la structure 2D/3D. L'étude du mécanisme de formation de la couche de pérovskite 2D est réalisée via l'analyse des propriétés structurales, chimiques et optoélectroniques de la structure, tout en faisant varier plusieurs paramètres de synthèse. Nous révélons la présence de brome au sein de la phase 2D et concluons sur l'existence d'un mécanisme de formation concomitant au mécanisme le plus communément admis, impliquant l'excès d'iodure de plomb (PbI₂) contenu dans la pérovskite 3D. Ainsi, nous démontrons comment la stœchiométrie de la pérovskite 2D est affectée par la composition chimique de la couche 3D sur laquelle elle est déposée. ^[5]

Cette étude apporte une meilleure compréhension des mécanismes de synthèse d'hétérostructures de pérovskites 2D/3D, pouvant conduire au développement de nouvelles structures 2D/3D plus performantes et fonctionnelles pour leur application en cellules photovoltaïques.

REFERENCES :

[1] Min, H. et al. Nature **2021**, 598 (7881), 444–450. DOI : 10.1038/s41586-021-03964-8.

[2] Cheng, Y. et al. Energy Environ. Sci. **2021**, 14, 3233–3255. DOI : 10.1039/D1EE00493J

[3] Grancini, G. et al. Nat. Commun. **2017**, 8, 15684. DOI : 10.1038/ncomms15684.

[4] Kim, D. et al. Science **2020**, 368(6487) : 155-160. DOI : 10.1126/science.aba3433.

[5] Campos, T. et al. J. Phys. Chem. C **2022**, 126 (31), 13527–13538. DOI : 10.1021/acs.jpcc.2c04957.