

Analyse du gradient de Gallium dans les absorbeurs à base de $\text{Cu}(\text{In}_{(1-x)}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$ par diffraction des rayons X.

Christophe Iatosti, Antoine Tiberj, Matthieu Moret, Wilfried Desrat, Olivier Briot.
L2C-UMR5221, CNRS, UM, Montpellier, France.

Le procédé 3 étapes a été décisif pour l'amélioration des couches d'absorbeur des cellules photovoltaïques à base de $\text{Cu}(\text{In}_{(1-x)}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$. Le dépassement volontaire de la stœchiométrie conduisant à la présence de $\text{Cu}_x\text{Se}_{x(1)}$ exacerbe deux mécanismes agissant sur la morphologie et les propriétés optoélectroniques des couches. D'une part, l'échange de matière des petits domaines cristallins vers les plus gros en vue d'une minimisation de leurs énergie totale et d'autre part une augmentation importante de la diffusion des espèces. La différence de diffusivité des éléments III est alors magnifiée et il en résulte un double gradient. Celui-ci permet une meilleure absorption des photons de hautes énergies ainsi que de ramener les porteurs photo-générés de la zone neutre vers la zone de charge d'espace. C'est ce double gradient que nous avons étudié par diffraction des rayons X.

Le paramètre de maille du $\text{Cu}(\text{In}_{(1-x)}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$ varie linéairement avec x . Le double gradient d'éléments III occasionne donc un élargissement des pics de diffraction. De plus, l'intensité diffractée décroît avec l'épaisseur due à l'absorption partielle du rayonnement incident. La contribution des couches proches du contact arrière est donc moins élevée que celles proche de l'interface CIGS/CdS. Il en résulte une déformation des pics à travers laquelle, le gradient peut être approché.

La modélisation du signal par discrétisation de l'épaisseur de l'absorbeur en assignant une composition à chaque élément d'épaisseur permet de reconstruire le signal et donc d'obtenir une information sur la forme du gradient.

Nous montrerons que la présence de ce gradient se traduit la plupart du temps par une structuration du pic de diffraction X en 2 composantes dont la position et l'amplitude en dépendent. Nous montrerons également que la non prise en compte de ce gradient conduit à une erreur importante lors de la détermination de la composition moyenne par pointé du pic principal de diffraction. Des mesures expérimentales sur une série d'échantillons à composition variable seront présentées et discutées dans le cadre du modèle décrit ci-dessus.