

硅异质结太阳电池的物理机制和优化设计

肖友鹏 王涛 魏秀琴 周浪

Physical mechanism and optimal design of silicon heterojunction solar cells

Xiao You-Peng Wang Tao Wei Xiu-Qin Zhou Lang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 66, 108801 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.108801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.108801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I10>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

超薄高速率单结微晶硅薄膜电池及其叠层电池

Ultra-thin film microcrystalline silicon with high deposition rate and its application in tandem silicon solar cells

物理学报.2015, 64(22): 228801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.228801>

选择性发射极晶体硅太阳电池的二维器件模拟及性能优化

Two-dimensional device simulation and performance optimization of crystalline silicon selective-emitter solar cell

物理学报.2014, 63(6): 068801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.068801>

α -Si:H/SiN_x 叠层薄膜对晶体硅太阳电池的钝化

Passivation property of α -Si:H/SiN_x stack-layer film in crystalline silicon solar cells

物理学报.2013, 62(19): 198801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.198801>

彩色多晶硅太阳电池性能研究

Performance of polycrystal silicon color solar cells

物理学报.2013, 62(16): 168802 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.168802>

一种新方法制备硅/聚(3, 4-乙撑二氧噻吩)核/壳纳米线阵列杂化太阳能电池

A new approach to fabricating silicon nanowire/poly(3, 4-ethylenedioxythiophene) hybrid heterojunction solar cells

物理学报.2013, 62(10): 108801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.108801>

硅异质结太阳电池的物理机制和优化设计^{*}

肖友鹏 王涛 魏秀琴 周浪[†]

(南昌大学光伏研究院/材料科学与工程学院, 南昌 330031)

(2016年12月30日收到; 2017年2月19日收到修改稿)

硅异质结太阳电池是一种由非晶硅薄膜层沉积于晶硅吸收层构成的高效低成本的光伏器件, 是一种具有大面积规模化生产潜力的光伏产品。异质结界面钝化品质、发射极的掺杂浓度和厚度以及透明导电层的功函数是影响硅异质结太阳电池性能的主要因素。针对这些影响因素已经有大量的研究工作在全世界范围内展开, 并且有诸多研究小组提出了器件效率限制因素背后的物理机制。洞悉物理机制可为今后优化设计高性能的器件提供准则。因此及时总结硅异质结太阳电池的物理机制和优化设计非常必要。本文主要讨论了晶硅表面钝化、发射极掺杂层和透明导电层之间的功函数失配以及由此形成的肖特基势垒; 讨论了屏蔽由功函数失配引起的能带弯曲所需的特征长度, 即屏蔽长度; 介绍了硅异质结太阳电池优化设计的数值模拟和实践; 总结了硅异质结太阳电池的研究现状和发展前景。

关键词: 硅异质结, 太阳电池, 物理机制, 优化设计

PACS: 88.40.Jj, 73.40.Lq, 81.15.Gh

DOI: 10.7498/aps.66.108801

1 引言

硅异质结(silicon heterojunction, SHJ)太阳电池是高效(>20%)低成本的硅基器件。硅异质结包括晶硅(crystalline silicon, c-Si)和非晶硅(a-Si:H)两种半导体, 其制备方法是通过化学气相沉积等技术在c-Si衬底上沉积a-Si:H薄膜。SHJ太阳电池的高效率来源于本征非晶硅[(i) a-Si:H]钝化c-Si表面获得的高开路电压(open-circuit voltage, V_{oc})^[1], 不过c-Si和a-Si:H之间以及a-Si:H和透明导电层(transparent conductive oxide, TCO)之间都会形成能带阶, 而且导带阶和价带阶不对称^[2], 都会影响光生载流子的输运和SHJ太阳电池的性能。SHJ太阳电池也会采用一定的扩散同质结硅太阳电池技术, 比如磷扩散吸杂技术, 能提升硅片的载流子寿命, 应用于SHJ太阳电池中对效率有一定的提升^[3]。电镀是一项有望取代丝网印刷技术的低成本大面积金属化制程, 有利于降低扩散同质结

硅太阳电池和SHJ太阳电池的制造成本^[4-7]。SHJ太阳电池的数值模拟和实验研究正在全球范围内展开, 对SHJ太阳电池的结构和工艺做出了许多分析和说明, 对SHJ太阳电池物理机制和性能影响因素的认识不断深入。将近年来关于SHJ太阳电池物理机制的理解和认识加以归纳总结, 对SHJ太阳电池优化设计加以分析疏理, 可以对后续SHJ太阳电池的研发和规模化生产提供有益的启示。

2 SHJ太阳电池物理机制和性能的影响因素

SHJ太阳电池的结构如图1所示, 图中晶硅为n型掺杂, 我们将基于(n) c-Si衬底垂直结构SHJ太阳电池展开分析。SHJ太阳电池载流子的收集是通过沉积在晶硅表面的本征/掺杂氢化非晶硅[(i) a-Si:H/(p)a-Si:H或(i) a-Si:H/(n) a-Si:H]叠层来实现的, 其中(p)a-Si:H为发射极, (n) a-Si:H起背面场作用。

* 国家自然科学基金(批准号: 51361022, 61574072)和江西省博士后研究人员科研项目(批准号: 2015KY12)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: lzhou@ncu.edu.cn

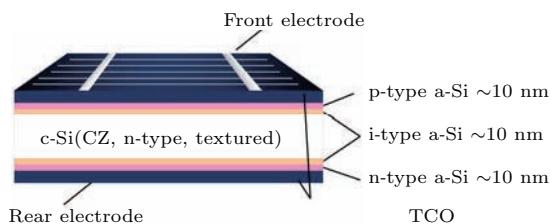
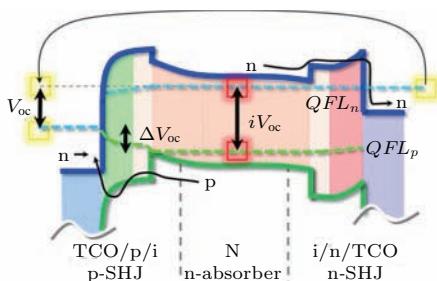
图 1 (网刊彩色) SHJ 太阳电池结构示意图^[1]

Fig. 1. (color online) Schematic structure of a SHJ solar cell^[1].

SHJ 太阳电池的能带如图 2 所示, 其明显的特征是接近(p)a-Si:H 发射极的 c-Si 吸收区形成了反型层, 伴随着反型层出现的是电子势垒, 此势垒是由 c-Si 的能带弯曲和 c-Si 与 a-Si:H 之间的导带带隙构成^[8]. 图 2 中 QFL_n 和 QFL_p 分别为电子和空穴准费米能级 (quasi-Fermi level, QFL). iV_{oc} (implied open circuit voltage) 是太阳电池的隐含开路电压, 是给定结构能够获得的理论最大 V_{oc} , 其与载流子的注入水平 $\Delta n = \Delta p$ 及准费米能级分裂 ($QFL_n - QFL_p$) 之间的关系为^[9]

$$iV_{oc} = \frac{QFL_n - QFL_p}{q} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{(n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p)}{n_i^2} \right), \quad (1)$$

式中 k 是玻尔兹曼常数, T 是绝对温度, q 是元电荷带电量, n_0 和 p_0 是热平衡状态下的载流子浓度, n_i 是本征载流子浓度.

图 2 (网刊彩色) 开路条件下 SHJ 太阳电池能带示意图^[10]

对于电学性能来说, 高效 SHJ 太阳电池需要满足三个基本的要求^[10]:

1) c-Si 表面钝化. SHJ 太阳电池一个重要的特征是 c-Si 吸收区的优秀钝化性能, 除了本征非晶硅缓冲层即(i) a-Si:H 对 c-Si 吸收区提供的化学钝化, 还有掺杂非晶硅薄膜层即(p)a-Si:H 和(n) a-Si:H 提供的场效应钝化^[11]. 化学钝化是指沉积(i) a-Si:H 时 H 原子对 c-Si 表面悬挂键的饱和, 场效应

钝化是指(p)a-Si:H 和(n) a-Si:H 分别与 c-Si 形成的内建电势分别对电子和空穴的驱赶作用, 从而空穴通过(p)a-Si:H 时电子被驱赶或电子通过(n) a-Si:H 时空穴被驱赶, 即形成了对空穴和电子的选择性接触^[12]. 非晶硅薄膜层与 c-Si 吸收区形成的两个异质结还会导致高的准费米能级分裂^[13], 因此 SHJ 太阳电池能够获得非常高的 V_{oc} . 下一步可以通过改善 SHJ 太阳电池的光管理获得更高的短路电流 (short circuit current, J_{sc}) 并且在最大功率点 (maximum power point, MPP) 降低复合损失来进一步提高 SHJ 太阳电池性能.

2) c-Si 能带弯曲. 为了分别形成电子和空穴的选择性接触, (n) a-Si:H 和 (p)a-Si:H 必须分别提供低的 (接近 c-Si 的导带即 4.1 eV) 和高的 (接近 c-Si 的价带即 5.3 eV) 功函数^[14], 从而导致强烈的能带弯曲, 在 c-Si 吸收区形成高的内建电势. 忽略如费米能级钉扎等效应, (p)a-Si:H 和 c-Si 功函数不同引起能带弯曲, 在空穴接触处形成一个对电子扩散的势垒^[15]. 如果 a-Si:H 的掺杂浓度很低, 部分能带弯曲将消失在 (p)a-Si:H 中^[16].

3) 在空穴和电子接触处形成连续多数载流子准费米能级 QFL ^[13]. (p)a-Si:H 必须充分掺杂, 以保证 c-Si 吸收区提供的 QFL 分裂可以维持在 (p)a-Si:H 甚至包括 n 型 TCO 的掺杂区域, 从而获得高的选择性来收集载流子. 形成连续多数载流子 QFL 而不是 QFL 梯度 (由于多数载流子的复合), 可以保证 SHJ 太阳电池的工作区域不是在高注入水平范围, 即实际的多数载流子浓度没有超过平衡多数载流子浓度. 扩散同质结硅太阳电池采用重掺杂, 不会出现这个问题. 而在 SHJ 太阳电池中 a-Si:H 掺杂效率低, 平衡多数载流子也非常低, 加上 TCO 和掺杂 a-Si:H 之间的功函数失配导致的载流子耗尽, 为了维持高的实际的多数载流子浓度, SHJ 太阳电池倾向于工作在高注入水平下, 表明在 SHJ 太阳电池中 V_{oc} 出现损失^[10].

因此掺杂非晶硅薄膜和透明导电层与 SHJ 太阳电池的性能密切相关, 下面我们从 SHJ 太阳电池物理机制的角度对两者展开分析.

2.1 掺杂非晶硅薄膜

SHJ 太阳电池中的异质结工程特别是受光面的异质结工程非常关键, 优化 (p)a-Si:H 发射极的厚度和掺杂浓度非常复杂: 1) 增加 (p)a-Si:H 发射极的厚度会降低 J_{sc} ^[17]; 2) (p)a-Si:H 发射极重掺杂

可以引起c-Si吸收层表面的去钝化,严重影响器件的 V_{oc} ^[18]; 3) 硅基合金薄膜由于其非晶结构通常掺杂效率很低^[19].

(p)a-Si:H发射极掺杂浓度对SHJ太阳电池性能有非常大的影响,这可以归结为以下几个方面: 1) (p)a-Si:H发射极应当被充分掺杂,以创造所需内建电势来驱赶(p)a-Si:H/c-Si界面的电子,增加(p)a-Si:H/c-Si界面的电子密度会增加(p)a-Si:H发射极饱和电流密度,导致更低的 V_{oc} 值^[20]; 2) (p)a-Si:H发射极应当能够在c-Si衬底创造充分的能带弯曲以让少子隧穿过程发生,而低掺杂发射极会阻挡少子隧穿,导致低的填充因子(fill factor, FF)值^[21–23]; 3) 为了改善载流子的收集,经常在发射极上沉积TCO,如果TCO的功函数(work function, WF)低于(p)a-Si:H发射极的功函数(常用的ITO的功函数为4.7 eV^[24]),会在TCO/(p)a-Si:H界面形成肖特基势垒^[25–27]. 半导体的功函数是真空能级与费米能级的差值,表征了载流子从半导体逸出到真空所需要的能量. TCO和(p)a-Si:H功函数失配形成的肖特基势垒对SHJ太阳电池性能有很大的影响,这主要是因为肖特基势垒与下面的(p)a-Si:H和c-Si形成的p-n结方向相反^[25–27],如图3所示. 肖特基势垒一方面会直接影响空穴的收集和SHJ太阳电池的 FF ,另一方面还会导致TCO中的电子注入到(p)a-Si:H发射极且与(p)a-Si:H发射极中的空穴复合,引起(p)a-Si:H中空穴耗尽甚至是反型^[28,29]. TCO/(p)a-Si:H/(i)a-Si:H叠层总的缺陷复合包括TCO/(p)a-Si:H和(p)a-Si:H/(i)a-Si:H界面的复合和占主导的(p)a-Si:H内的复合^[30],复合的结果是在小注入范围内MPP内部电压(internal voltage)的损失,进而导致 FF 损失^[31]. 因此,(p)a-Si:H发射极必须充分掺杂以在(p)a-Si:H发射极中维持平带条件(即阻止TCO/(p)a-Si:H能带弯曲的同时在(p)a-Si:H/c-Si界面处形成能带弯曲)^[32].

有效屏蔽长度(effective screening length)是屏蔽TCO/(p)a-Si:H肖特基势垒高度所需的特征长度,给定(p)a-Si:H发射极的有效屏蔽长度界定了(p)a-Si:H发射极厚度的下限. (p)a-Si:H发射极的有效屏蔽长度 $L_{(p)a-Si:H}$ 可由(2)式获得^[33]:

$$L_{(p)a-Si:H} = 2 \cdot \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r kT}{2q^2 |Q_{tot,(p)a-Si:H}|}} \times \sqrt{\frac{q|\Delta WF|}{kT}}, \quad (2)$$

式中 ε_0 是真空介电常数, ε_r 是相对介电常数, k 是玻尔兹曼常数, T 是绝对温度, q 是元电荷带电量; $Q_{tot,(p)a-Si:H}$ 是平衡条件下(p)a-Si:H发射极中总的空间电荷密度,与(p)a-Si:H的掺杂浓度有关; ΔWF 是TCO和(p)a-Si:H发射极之间的功函数失配. 由(2)式可知功函数失配越大,(p)a-Si:H的掺杂浓度越低,所需的有效屏蔽长度越大. 如果(p)a-Si:H的厚度 d 大于其有效屏蔽长度 $L_{a-Si:H(p)}$, (p)a-Si:H发射极的耗尽从而反向肖特基势垒的负面影响仅局限于TCO/(p)a-Si:H界面附近(p)a-Si:H发射极部分区域. 如果(p)a-Si:H的厚度 d 小于其有效屏蔽长度 $L_{a-Si:H(p)}$,即掺杂不充分和/或TCO/(p)a-Si:H之间功函数失配太大,(p)a-Si:H发射极的耗尽不仅局限在TCO/(p)a-Si:H界面附近(p)a-Si:H发射极区域,而是整个(p)a-Si:H都被耗尽^[34],如图4所示. 有效屏蔽长度影响光吸收从而影响SHJ太阳电池的 J_{sc} , TCO/(p)a-Si:H肖特基势垒影响空穴输运从而影响SHJ太阳电池的 FF ,因此有效屏蔽长度和TCO/(p)a-Si:H肖特基势垒将导致SHJ太阳电池 J_{sc} 和 FF 之间的相互妥协^[17,34–36].

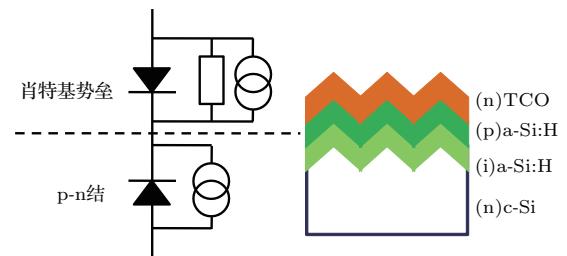


图3 (网刊彩色) 包括TCO/(p)a-Si:H形成的肖特基势垒和(p)a-Si:H/c-Si形成的p-n结的等效电路图

Fig. 3. (color online) Equivalent circuit diagram including a reverse Schottky diode forming between TCO and (p)a-Si:H and the p-n junction forming between (p)a-Si:H and c-Si.

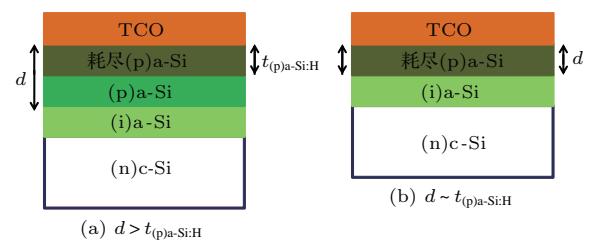


图4 (网刊彩色) TCO/(p)a-Si:H界面耗尽示意图 (a) 厚的(p)a-Si:H掺杂层; (b) 薄的(p)a-Si:H掺杂层

Fig. 4. (color online) Schematics representing the depletion occurring at TCO/(p)a-Si:H interface for (a) a thick (p)a-Si:H layer and (b) a thin (p)a-Si:H layer.

生长(p)a-Si:H掺杂层时还会对下面的(i) a-Si:H缓冲层造成影响进而影响(i) a-Si:H/c-Si的界面钝化性能^[37]。沉积掺杂a-Si:H到(i) a-Si:H/c-Si对钝化的影响可以解释为a-Si:H层中非晶网络亚稳特性引起的缺陷平衡(即在a-Si:H中源于Si—Si应力键形成的与费米能级 E_F 有关的悬挂键缺陷)。(p)a-Si:H掺杂浓度、厚度和(i) a-Si:H层的沉积条件等参数的变化引起a-Si:H网络结构中应力和异质结界面处费米能级 E_F 的变化,而费米能级 E_F 的变化会引起部分能带弯曲^[38]。因此(p)a-Si:H/(i) a-Si:H叠层薄膜的钝化作用与异质结界面处的费米能级 E_F 位置有关。一方面(p)a-Si:H掺杂浓度的变化引起费米能级 E_F 的移动,另一方面(i) a-Si:H层加厚能减少c-Si的能带弯曲,导致费米能级 E_F 向禁带中央移动。因此a-Si:H中应力键密度和a-Si:H/c-Si异质结界面处费米能级 E_F 位置共同决定了a-Si:H/c-Si界面的钝化潜力,从而影响SHJ太阳电池的 V_{oc} 。由于Si—Si应力键和悬挂键之间的相互转换,借助缺陷池模型(defect-pool model)^[39,40]可以描述a-Si:H乌尔巴赫能量(Si—Si应力键密度)、费米能级 E_F 移动和a-Si:H体缺陷浓度之间的相互作用,a-Si:H乌尔巴赫能量更大时代表了更大的潜在的缺陷池。

太薄的(i) a-Si:H缓冲层不能减弱其上的(p)a-Si:H掺杂层对c-Si表面钝化品质的破坏^[39],因此对于SHJ太阳电池,需要在c-Si钝化性能和(p)a-Si:H掺杂浓度之间进行妥协,需要在掺杂时变化的 V_{oc} 和 FF 之间进行妥协。如果改善(p)a-Si:H掺杂层和TCO之间功函数匹配状况,(p)a-Si:H掺杂(费米能级 E_F 移动)导致a-Si:H体缺陷的形成(降低 V_{oc})和TCO/(p)a-Si:H接触性能的改善(FF , V_{oc} 和 J_{sc} 的改善)之间的相互妥协将变得不那么深刻^[33]。

2.2 透明导电氧化层

TCO在SHJ太阳电池中有两个重要的任务,一是有效光耦合进入c-Si,二是往前金属栅线传导电流^[41]。另外它们也应保证从SHJ太阳电池的电子和空穴收集层有效横向提取载流子。对于这种载流子的有效横向提取,最少需满足两个要求,一是TCO应当产生最小的以为有效输运载流子所需的接触电阻,二是TCO(和其沉积技术)不应降低其下薄膜层的钝化性能,不对c-Si吸收层中载流子

的复合产生影响^[42]。这两个要求越得到满足,接触的载流子选择性越高,更能收集一类载流子的同时驱赶另一类载流子。实际上,这两个需求得到满足的关键是TCO和非晶硅以及晶硅层之间的能带排列^[43]。

TCO与(p)a-Si:H层接触时必须保持足够高的电导率,以最小化载流子复合和传输损耗,使得SHJ太阳电池获得高的 FF 。SHJ太阳电池对前TCO层和背TCO层的光学和电学性能要求很不相同,通常前ITO层的电阻约 $10^{-4} \Omega\cdot\text{cm}$,载流子浓度为 $2\text{--}3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$,而背ITO层的电阻为 $10^{-3}\text{--}10^{-2} \Omega\cdot\text{cm}$,载流子浓度为 $1\text{--}9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 。对于c-Si的表面钝化,高掺杂TCO的存在对(i) a-Si:H/(n) a-Si:H叠层的钝化作用没有坏处,但对(i) a-Si:H/(p)a-Si:H叠层的钝化作用却正好相反,因此在前接触中应该避免高掺杂TCO与(i) a-Si:H/(p)a-Si:H叠层接触^[44]。

当TCO的功函数低于(p)a-Si:H层的功函数时,两者接触会导致(p)a-Si:H的耗尽甚至是反型。(p)a-Si:H的掺杂浓度很低且TCO与(p)a-Si:H功函数失配很大时,不仅界面而且整个a-Si:H层都会耗尽甚至是反型。耗尽和反型会影响载流子的提取,进而影响太阳电池的 FF 。耗尽和反型还会导致(p)a-Si:H/(n) c-Si结的能带弯曲程度降低和内建电势下降,从而引起SHJ太阳电池接触处载流子的选择性降低和 V_{oc} 的下降,如图5所示,图中箭头表示功函数失配增加。因此降低功函数失配并且增加(p)a-Si:H层的掺杂浓度会改善接触性能^[45]。如果TCO的功函数高于(p)a-Si:H的功函数,则会引起(p)a-Si:H中空穴的积累,空穴积累可看作是(p)a-Si:H掺杂浓度的增加,也有利于改善TCO与(p)a-Si:H的接触性能^[46]。

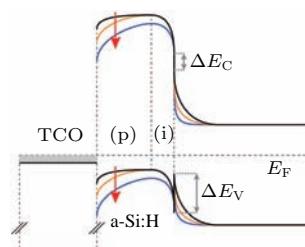


图5 (网刊彩色) TCO功函数对(p)a-Si:H/(i) a-Si:H端能带排列影响的能带示意图^[47]

Fig. 5. (color online) Schematic band diagram illustrating the effect of the TCO WF on the band alignment at the (p)a-Si:H/(i) a-Si:H-side^[47].

3 SHJ 太阳电池优化设计数值模拟和实践

Bivour 等^[33]基于 Sentaurus TCAD 软件模拟了 SHJ 太阳电池的性能。模拟时把 n 型半导体 TCO 处理为具有界面功函数 (WF_{if}) 的导电层。 $(p)a\text{-Si:H}$ 发射极的激活能为 200 meV 和 300 meV 时, 对应的功函数 WF 分别为 5.4 eV 和 5.3 eV, 即掺杂浓度越高, 激活能越低, 对应的功函数 WF 越高。图 6 显示了 TCO 功函数 WF_{if} , $(p)a\text{-Si:H}$ 掺杂浓度和厚度之间的相互作用及其对 SHJ 太阳电池性能的影响。

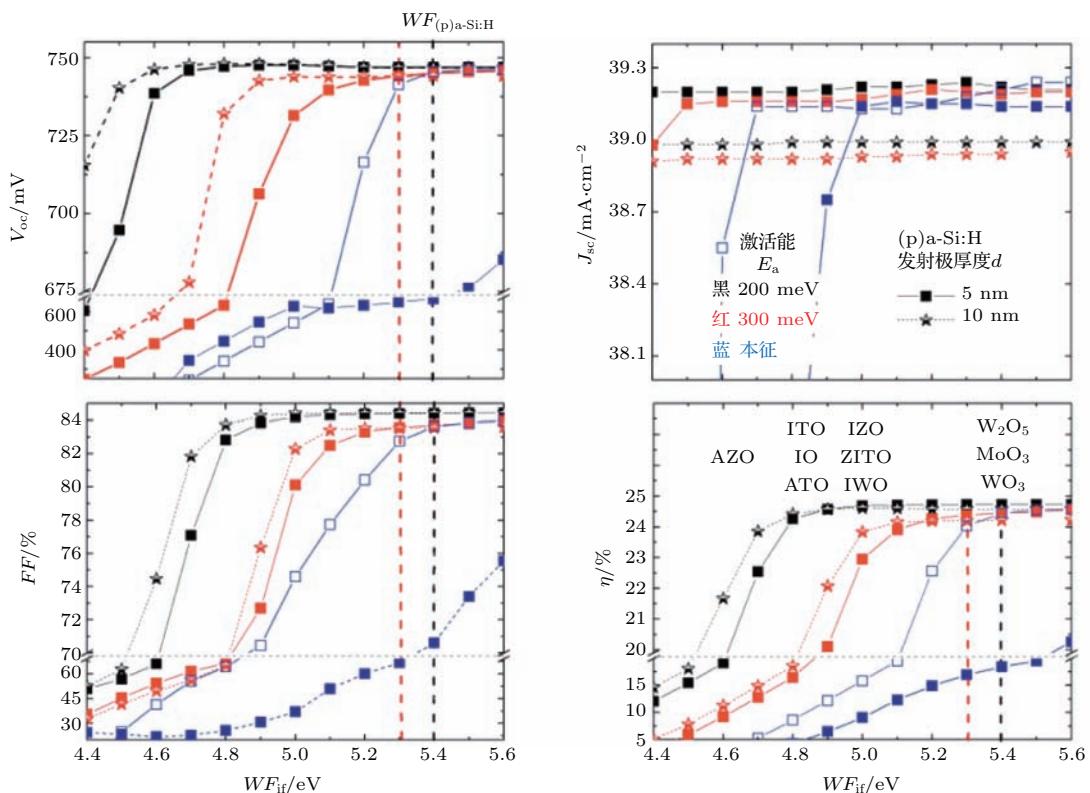
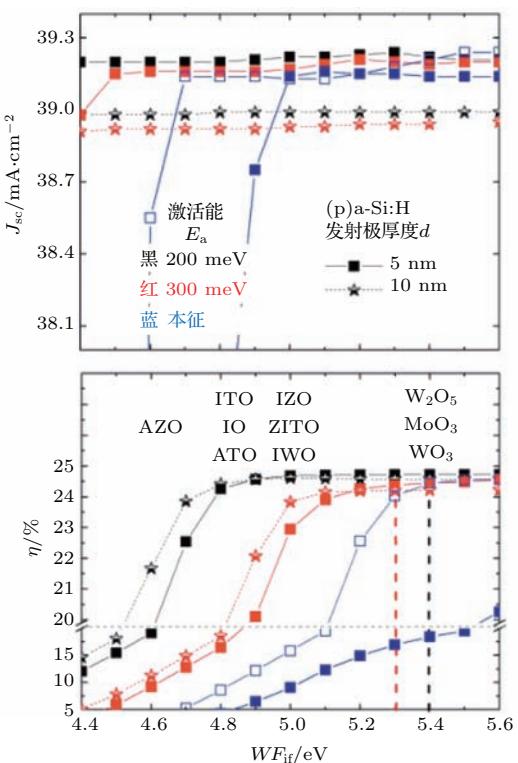


图 6 (网刊彩色) $(p)a\text{-Si:H}$ 不同掺杂浓度和厚度时 V_{oc} , FF , J_{sc} 和 η 与 WF_{if} 的关系^[33]

Fig. 6. (color online) V_{oc} , FF , J_{sc} and the efficiency as a function of WF_{if} for different $(p)a\text{-Si:H}$ doping and $(p)a\text{-Si:H}$ thicknesses^[33].

为了提升 SHJ 太阳电池的性能, 可以将空穴收集层即 $(p)a\text{-Si:H}$ 发射极放置在太阳电池背部, 即所谓的背发射极(rear emitter, RE) SHJ 太阳电池^[48]。RE-SHJ 太阳电池受光面 TCO 与 (i) $a\text{-Si:H}/(n)a\text{-Si:H}$ 叠层接触, 背部 $(p)a\text{-Si:H}$ 层厚度增加的同时不会降低光学性能, 因此可以增强屏蔽效应。如果在 SHJ 太阳电池受光面采用扩散前表面场(front surface filed, FSF), 构成以 RE 和 FSF 为特征的混合硅异质结(hybrid SHJ)太阳电池^[5,48–50], 如图 7 所示, 则能更好地利用 c-Si 衬底的电导率, 释放了对受光面 TCO 层横向电导率的要求, 背部

浓度和厚度之间的相互作用及其对 SHJ 太阳电池性能的影响。可以看到 WF_{if} 高时能获得最优的太阳电池结果, 这可以归结为 TCO/ $(p)a\text{-Si:H}$ 界面正的功函数失配 ($WF_{if} > WF_{(p)a\text{-Si:H}}$) 从而在 $(p)a\text{-Si:H}$ 发射极中形成空穴积累。而如果是负的功函数失配 ($WF_{if} < WF_{(p)a\text{-Si:H}}$), 则形成的反向肖特基势垒会引起 $(p)a\text{-Si:H}$ 发射极空穴耗尽, 降低器件性能。从图中还能看到 $(p)a\text{-Si:H}$ 发射极厚度更厚、掺杂浓度更高则更能忍受负的功函数失配, SHJ 太阳电池的 V_{oc} 和 FF 更大。



由于覆盖上金属层后可以不必要求 TCO 的横向输运作用, 因此可以采用较高电阻的 TCO。混合硅异质结太阳电池在优化 $(p)a\text{-Si:H}$ 层掺杂浓度和厚度、 $(p)a\text{-Si:H}/TCO$ 界面时因为不用过多关注非晶硅叠层的本征吸收, 而将注意力集中在载流子的复合和/或载流子的输运上, 因此可进一步增加太阳电池设计自由度^[49]。

为了提升 SHJ 太阳电池的性能, 还可以选用高功函数的 MoO_x , WO_x 和 VO_x 等过渡族金属元素氧化物取代 $(p)a\text{-Si:H}$ 发射极来充当空穴收集层^[26,51–55], 如图 8 所示, 图中空穴收集层为 MoO_x 。

过渡族金属元素氧化物和c-Si吸收层形成的异质结由于具有不同的功函数，导致能带弯曲并进入c-Si吸收层，会在c-Si吸收层表面感应出一个同质结，此感应同质结与c-Si吸收层表面p型掺杂形成的结相似。因此c-Si吸收层顶部放置金属氧化物空穴收集层不仅可提供对于光生载流子的选择性，还对c-Si表面有良好的钝化效果，并且金属氧化物空穴收集层本身也具有低复合属性。进一步地，采用金属氧化物空穴收集层可以规避接触区域高的载流子浓度带来的重掺杂效应，如俄歇复合和禁带变窄效应。因此过渡族金属元素氧化物形成的优秀钝化性能和有效载流子选择性接触可以改善SHJ太阳电池性能。

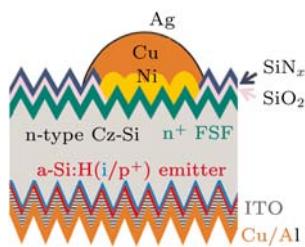


图7 (网刊彩色) 混合硅异质结太阳电池示意图^[5]

Fig. 7. (color online) Schematic description of hybrid SHJ solar cell^[5].

为了提升SHJ太阳电池的性能，还可以选用 μ c-Si:H, μ c-SiO_x:H和 μ c-SiC_x:H等^[56–61]微晶硅系列合金取代(p)a-Si:H发射极充当空穴收集层。微晶硅系列合金是直接带隙半导体，能够降低短波长的光吸收，有利于提高太阳电池的 J_{sc} 。微晶硅系列合金掺杂效率更高、电阻率更低，有利于改善载流子的输运性能和接触性能，抑制肖特基势垒的影响，提高SHJ太阳电池的 FF 。

表1 n型衬底前结SHJ太阳电池
Table 1. Front-junction SHJ solar cells results on n-type c-Si.

机构	$\eta/\%$	$J_{sc}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	V_{oc}/mV	$FF/\%$	面积/ cm^2	年份	文献
SERIS	21.1	38.2	702	78.6	1	2012	[62]
EPFL	22.4	39.15	728	78.6	4	2014	[4]
EPFL ^{a)}	22.5	38.6	725.4	80.36	3.93	2015	[52]
SIMIT	23.1	38.3	741	81.3	156	2016	[63]
Silevo	23.12	38.9	739	80.5	156	2015	[6]
ASU	23.4	40.4	739	78	4	2015	[64]
Panasonic	24.7	39.5	750	83.2	101.8	2013	[1]
Kaneka	25.1	40.8	738	82.5	151.9	2015	[65]

a) 空穴收集层为MoO_x。

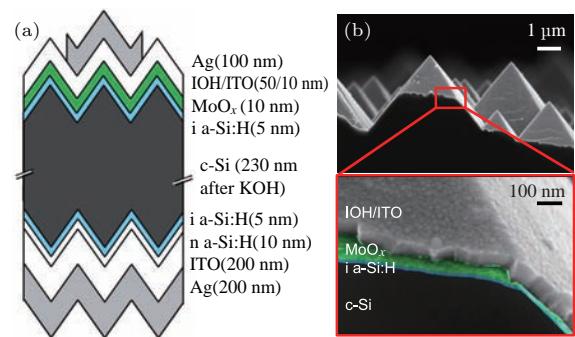


图8 (网刊彩色) (a) MoO_x/a-Si:H/c-Si异质结太阳电池结构示意图及相对应的(b)扫描电子显微镜成像的伪色截面图^[51]

Fig. 8. (color online) (a) Schematic of the MoO_x/a-Si:H/c-Si heterojunction solar cell structure with (b) false-colored cross section imaged by scanning electron microscopy^[51].

4 SHJ太阳电池的研究现状和发展前景

SHJ太阳电池的研发热潮正席卷全球，一方面采用先进工艺追求高效率，这也能在产生相同电力时相对降低生产成本，另一方面是采用新材料和新工艺降低电池制造成本，这也能在制造过程中有机会避免使用有毒的硼等掺杂元素。n型衬底SHJ太阳电池效率超过20%的结果如表1、表2和表3所列。其中IBC (interdigitated back contact)-SHJ太阳电池即叉指背接触SHJ太阳电池，这种电池结构去除了受光面的金属栅线，能最小化电池前面的光吸收且最大化光耦合进入硅片，但需要先进复杂的掩模工艺将电子和空穴接触都制备在太阳电池的背面。

表2 n型衬底背结SHJ太阳电池
Table 2. Back-junction SHJ solar cells results on n-type c-Si.

机构	$\eta/\%$	$J_{sc}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	V_{oc}/mV	$FF/\%$	面积/ cm^2	年份	文献
EPFL ^{b)}	21.1	36.9	721	79.3	4	2016	[59]
IMEC ^{c)}	21.5	39.1	677.3	81.3	243.36	2015	[5]
Hanergy	21.72	35.77	721.3	78.20	152.3	2015	[66]
CEA-INES	22.2	38.7	733	78.5	103	2012	[67]
CIC	22.3	37.28	733	81.8	243	2013	[68]
Fraunhofer ISE ^{d)}	22.8	39.9	705	81.5	4	2012	[48]
AUO	23.43	38.5	730	83.35	238.9	2015	[69]

b) 空穴收集层为 $\mu\text{-Si:H}$, 另外 EPFL 还发布了以 $\mu\text{-SiC}_x:\text{H}$ 为空穴收集层的 p 型衬底背结 SHJ 太阳电池, 其效率为 20.44% [58]; c) 和 d) 为混合异质结 SHJ 太阳电池。

表3 n型衬底IBC-SHJ太阳电池
Table 3. IBC-SHJ solar cells results on n-type c-Si.

机构	$\eta/\%$	$J_{sc}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	V_{oc}/mV	$FF/\%$	面积/ cm^2	年份	文献
HZB	20.2	39.7	673	75.7	1	2012	[70]
LG	20.5	37.5	716	76.4	221	2013	[71]
CEA-INES	20.55	711	40.11	72.1	18.11	2016	[72]
EPFL	22.	40.9	726	74	9	2015	[73]
IMEC	22.9	41.6	729	75.3	3.97	2016	[74]
Sharp	25.1	41.7	736	81.9	3.72	2014	[75]
Panasonic	25.6	41.8	740	82.7	143.7	2014	[76]
Kaneka	26.33	42.3	744	83.8	180.4	2016	[77]

随着相关理论研究进一步深入以及掺杂控制、异质结界面工程、结构设计和制备工艺进一步优化, SHJ 太阳电池可望实现更高的转换效率、更低的制造成本, 在可预见的未来将占据光伏市场重要的市场份额。

参考文献

- [1] Taguchi M, Yano A, Tohoda S, Matsuyama K, Nakamura Y, Nishiwaki T, Fujita K, Maruyama E 2014 *IEEE J. Photovolt.* **4** 96
- [2] Seif J P, Menda D, Descoedres A, Barraud L, Özdemir O, Ballif C, de Wolf S 2016 *J. Appl. Phys.* **120** 1433
- [3] Zhu F, Wang D, Bian J, Liu J, Liu Z 2016 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **157** 74
- [4] Geissbühler J, de Wolf S, Faes A, Badel N, Jeangros Q, Tomasi A, Barraud L, Descoedres A, Despeisse M, Ballif C 2014 *IEEE J. Photovolt.* **4** 1055
- [5] Tous L, Granata S N, Choulat P, Bearda T, Michel A, Uruena A, Cornagliotti E, Aleman M, Gehlhaar R, Russell R, Duerinckx F, Szlufcik J 2015 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **142** 66
- [6] Heng J B, Fu J, Kong B, Chae Y, Wang W, Xie Z, Reddy A, Lam K, Beitel C, Liao C, Erben C, Huang Z, Xu Z 2015 *IEEE J. Photovolt.* **5** 82
- [7] Dabirian A, Lachowicz A, Schüttauf J W, Paviet-Salomon B, Morales-Masis M, Hessler-Wyser A, Despersse M, Ballif C 2017 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **159** 243
- [8] Madani Ghahfarokhi O, Chakanga K, Geissendoerfer S, Sergeev O, von Maydell K, Agert C 2015 *Prog. Photovoltaic Res. Appl.* **23** 1340
- [9] Sinton R A, Cuevas A 1996 *Appl. Phys. Lett.* **69** 2510
- [10] Bivour M, Reusch M, Schröer S, Feldmann F, Temmler J, Steinkemper H, Hermle M 2014 *IEEE J. Photovolt.* **4** 566
- [11] Schuttauf J W A, van der Werf K H M, Kielen I M, Kielen I M, van Sark W G J H M, Rath J K, Schropp R E I 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 153514

- [12] Chen J H, Yang J, Shen Y J, Li F, Chen J W, Liu H X, Xu Y, Mai Y H 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 198801 (in Chinese) [陈剑辉, 杨静, 沈艳娇, 李锋, 陈静伟, 刘海旭, 许颖, 麦耀华 2015 物理学报 **64** 198801]
- [13] Pysch D, Meinhard C, Harder N P, Hermle M, Glunz S W 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 094516
- [14] Tasaki H, Kim W Y, Hallerdt M, Konagai M, Takahashi K 1988 *J. Appl. Phys.* **63** 550
- [15] Leendertz C, Mingirulli N, Schulze T F, Kleider J P 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 202108
- [16] de Wolf S, Kondo M 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 103707
- [17] Holman Z C, Descoeuilles A, Barraud L, Fernandez F Z 2012 *IEEE J. Photovolt.* **2** 7
- [18] Schulze T F, Leendertz C, Mingirulli N, Korte L, Rech B 2011 *Energy Procedia* **8** 282
- [19] Janotta A, Janssen R, Schmidt M, Graf T, Stutzmann M, Görgens L, Bergmaier A, Dollinger G, Hammerl C, Schreiber S, Stritzker B 2004 *Phys. Rev. B* **69** 115206
- [20] Kane D E, Swanson R M 1985 *Proceedings of the 18th IEEE Photovoltaic Specialists Conference* New York, USA, 1985 p578
- [21] Cleef M W M V, Schropp R E I, Rubinelli F A 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 2609
- [22] Varache R, Kleider J P, Gueunier-Farret M E, Korte L 2013 *Mater. Sci. Eng.: B* **178** 593
- [23] Kirner S, Hartig M, Mazzarella L, Korte L, Frijnts T, Scherg-Kurmes H, Ring S, Stannowski B, Rech B, Schlatmann R 2015 *Energy Procedia* **77** 725
- [24] Klein A, Körber C, Wachau A, Säuberlich F, Gassanbauer Y, Harvey S P, Proffit D E, Mason T O 2010 *Materials* **3** 4892
- [25] Zhao L, Zhou C L, Li H L, Diao H W, Wang W J 2008 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **92** 673
- [26] Ritzau K U, Bivour M, Schröer S, Steinkemper H, Reinecke P, Wagner F, Hermle M 2014 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **131** 9
- [27] Ghannam M, Abdulraheem Y, Shehada G 2016 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **145** 423
- [28] Zhong C L, Geng K W, Yao R H 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6538 (in Chinese) [钟春良, 耿魁伟, 姚若河 2010 物理学报 **59** 6538]
- [29] Wen X, Zeng X, Liao W, Lei Q, Yin S 2013 *Solar Energy* **96** 168
- [30] Favre W, Coignus J, Nguyen N, Lachaume R, Cabal R, Muñoz D 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 181118
- [31] Reusch M, Bivour M, Hermle M, Glunz S W 2013 *Energy Procedia* **38** 297
- [32] Kim J, Abou-Kandil A, Fogel K, Hovel H, Sadana D K 2010 *ACS Nano* **4** 7331
- [33] Bivour M, Schröer S, Hermle M 2013 *Energy Procedia* **38** 658
- [34] Lachaume R, Favre W, Scheiblin P, Garros X, Nguyen N, Coignus J, Munoz D, Reimbold G 2013 *Energy Procedia* **38** 770
- [35] Korte L, Conrad E, Angermann H, Stangl R, Schmidt M 2009 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **93** 905
- [36] Nicolás S M D, Muñoz D, Ozanne A S, Nguyen N, Ribeyron P J 2011 *Energy Procedia* **8** 226
- [37] de Wolf S, Kondo M 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 112109
- [38] Schulze T F, Beushausen H N, Leendertz C, Dobrich A, Rech B, Korte L 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 515
- [39] Powell M J, Deane S C 1993 *Phys. Rev. B* **48** 10815
- [40] Powell M J, Deane S C 1996 *Phys. Rev. B* **53** 10121
- [41] Holman Z C, Filipic M, Descoeuilles A, de Wolf S, Smole F, Topic M, Ballif C 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 013107
- [42] Demaurex B, de Wolf S, Descoeuilles A, Holman Z C, Ballif C 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 171604
- [43] Rößler R, Leendertz C, Korte L, Mingirulli N, Rech B 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 144513
- [44] Centurioni E, Iencinella D 2003 *IEEE Electron Device Lett.* **70** 177
- [45] Ji K S, Choi J, Choi W S, Lee H M, Kim D H 2010 *Proceeding of the 35th IEEE Photovoltaic Specialists Conference* Honolulu, Hawaii, June 20–25, 2010 p003190
- [46] Maslova O A, Alvarez J, Gushina E V, Favre W, Gueunier-Farret M E, Gudovskikh A S, Ankudinov A V, Terukov E I, Kleider J P 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 252110
- [47] Demaurex B, Seif J P, Smit S, Macco B, Kessels W M, Geissbühler J, de Wolf S, Ballif C 2014 *IEEE J. Photovolt.* **4** 1387
- [48] Bivour M, Reichel C, Hermle M, Glunz S W 2012 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **106** 11
- [49] Bivour M, Steinkemper H, Jeurink J, Schröer S, Hermle M 2014 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **122** 120
- [50] Qiu Z X, Ke C M, Aberle A G, Stangl R 2015 *IEEE J. Photovolt.* **5** 1053
- [51] Battaglia C, Nicolas S M D, de Wolf S, Yin X, Zheng M, Ballif C, Javey A 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 113902
- [52] Geissbühler J, Werner J, Nicolas S M D, Barraud L, Hessler-Wyser A, Despeisse M, Nicolay S, Tomasi A, Niesen B, de Wolf S, Ballif C 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 081601
- [53] Bivour M, Jeurink J, Steinkemper H, Hermle M 2015 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **142** 34
- [54] Gerling L G, Mahato S, Morales-Vilches A, Masmitja G, Ortega P, Voz C, Alcubilla R, Puigdolers J 2016 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **145** 109
- [55] Mews M, Korte L, Rech B 2016 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **158** 77
- [56] Qiao Z, Xie X J, Xue J M, Liu H, Liang L M, Hao Q Y, Liu C C 2015 *Acta Phys. -Chim. Sin.* **31** 1207 (in Chinese) [乔治, 解新建, 薛俊明, 刘辉, 梁李敏, 赫秋艳, 刘彩池 2015 物理化学学报 **31** 1207]
- [57] Ghahfarokhi O M, Maydell K V, Agert C 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 113901
- [58] Seif J P, Descoeuilles A, Nogay G, Hänni S, Nicolas S M D, Holm N, Geissbühler J, Hessler-Wyser A, Duchamp M, Dunin-Borkowski R E, Ledinsky M, de Wolf S, Ballif C 2016 *IEEE J. Photovolt.* **6** 1
- [59] Nogay G, Seif J P, Riesen Y, Tomasi A, Jeangros Q, Wyrsch N, Haug F J, de Wolf S, Ballif C 2016 *IEEE J. Photovolt.* **6** 1654

- [60] Mazzarella L, Kirner S, Stannowski B, Korte L, Rech B, Schlatmann R *2015 Appl. Phys. Lett.* **106** 023902
- [61] Nogay G, Stuckelberger J, Wyss P, Jeangros Q, Alleb C, Niquelle X, Debrot F, Despeisse M, Haug F J, Löper P, Ballif C *2016 ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 35660
- [62] Mueller T, Wong J, Aberle A G *2012 Energy Procedia* **15** 97
- [63] Meng F, Liu J, Shen L, Shi J, Han A, Zhang L, Liu Y, Yu J, Zhang J, Zhou R, Liu Z *2017 Front Energy* **11** 78
- [64] Herasimenka S Y, Dauksher W J, Tracy C J, Lee J, Augusto A, Jain H, Tyler K, Kiefer Z, Balaji P, Bowden S, Honsberg C *2015 Proceedings of the 31st European Photovoltaic Solar Energy Conference* Hamburg, Germany, September 14–18, 2015 p761
- [65] Adachi D, Hernández J L, Yamamoto K *2015 Appl. Phys. Lett.* **107** 233506
- [66] Yu C, Yang M, Zhang Y, Yi Z, Yang Y, Xie T, Deng L, Yan H, Zhang J, Xu X *2015 Proceedings of the 42nd IEEE Photovoltaic Specialist Conference* Los Angeles, USA, June 14–19, 2015 p1
- [67] Muñoz D, Desrues T, Ozanne A S, Vecchi S D, Nicolàs S M D, Jay F, Souche F, Nguyen N, Denis C, Arnal C, d'Alonzo G, Coignus J, Favre W, Blévin T, Valla A, Ozanne F, Salvetat T, Ribeyron P J *2012 Proceedings of the 27th European Photovoltaic Solar Energy Conference* Frankfurt, Germany, September 24–28, 2012 p576
- [68] Kobayashi E, Nakamura N, Hashimoto K, Watabe Y *2013 Proceedings of the 28th European Photovoltaic Solar Energy Conference* Villepinte, France, September 30–October 4, 2013 p691
- [69] Shih Z Y, Chen F S, Chang J, Hsieh W C, Chen M Y *2015 Proceedings of the 31st European Photovoltaic Solar Energy Conference* Hamburg, Germany, September 14–18, 2015 p884
- [70] Mingirulli N, Haschke J, Gogolin R, Ferre R, Schulze TF, Dusterhoft J, Harder N P, Korte L, Brendel R, Rech B *2011 Phys. Status Solidi Rapid Res. Lett.* **5** 159
- [71] Lee S Y, Choi H, Li H, Ji K, Nam S, Choi J, Ahn S W, Lee H M, Park B *2014 Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **120** 412
- [72] Harrison S, Nos O, D'Alonzo G, Denis C, Coll A, Munoz D *2016 Energy Procedia* **92** 730
- [73] Paviet-Salomon B, Tomasi A, Descoedres A, Barraud L, Nicolay S, Despeisse M, de Wolf S, Ballif C *2015 IEEE J. Photovolt.* **5** 1293
- [74] Radhakrishnan H S, Bearda T, Xu M, Jonnak S K, Malik S, Hasan M, Depauw V, Filipič M, Nieuwenhuysen K V, Abdulraheem Y, Debucquo M, Gordon I, Szlufcik J, Poortmans J *2016 Proceedings of the 43rd IEEE Photovoltaic Specialists Conference* Portland, USA, June 5–10, 2016 p1182
- [75] Nakamura J, Asano N, Hieda T, Okamoto C, Katayama H, Nakamura K *2014 IEEE J. Photovolt.* **4** 1491
- [76] Masuko K, Shigematsu M, Hashiguchi T, Fujishima D, Kai M, Yoshimura N, Yamaguchi T, Ichihashi Y, Mishima T, Matsubara N, Yamanishi T, Takahama T, Taguchi M, Maruyama E, Okamoto S *2014 IEEE J. Photovolt.* **4** 1433
- [77] Yoshikawa K, Kawasaki H, Yoshida W, Irie T, Konishi K, Nakano K, Uto T, Adachi D, Kanematsu M, Uzu H, Yamamoto K *2017 Nature Energy* **2** 17032

Physical mechanism and optimal design of silicon heterojunction solar cells*

Xiao You-Peng Wang Tao Wei Xiu-Qin Zhou Lang[†]

(Institute of Photovoltaic/ School of Materials Science and Engineering, Nanchang University, Nanchang 330031, China)

(Received 30 December 2016; revised manuscript received 19 February 2017)

Abstract

Silicon heterojunction (SHJ) solar cells are crystalline silicon wafer-based photovoltaic devices fabricated with thin-film deposition technology. The SHJ solar cells hold great potential for large-scale deployment for high conversion efficiencies with low-cost manufacturing. Recently Kaneka Corporation has fabricated an interdigitated-back-contact (IBC) SHJ solar cell with a certified 26.33% conversion efficiency in a large area (180.4 cm^2), which is a world record for any 1-sun crystalline silicon wafer-based solar cell. The key feature of SHJ solar cells is the impressive highopen-circuit voltages (V_{oc}) achieved by the excellent amorphous/crystalline silicon interface passivation. Generally, in SHJ solar cells, the boron doped hydrogenated amorphous silicon [(p)a-Si:H] serves as hole collector and the phosphorus doped hydrogenated amorphous silicon [(n) a-Si:H] functions as electron collector. In order to improve the lateral carrier transport of these layers, transparent conductive oxides (TCOs) are usually deposited on both sides of the solar cell. Therefore the parameters such as the heterointerface passivation quality, doping concentration and thickness of the a-Si:H doped layer, and work function of the transparent conductive oxide layer are the key factors that affect the performances of SHJ solar cells. Enormous research efforts have been devoted to studying the effects of the aforementioned influencing parameters on the photovoltaic characteristics of SHJ solar cells. Some research groups have addressed the physical mechanism behind the limitation of the solar cell efficiency. Owing to the insight into the physical mechanism some guidelines for optimally designing the high-performance solar cells in future are obtained. It seems therefore important to summarize the research efforts devoted to the physical mechanism and optimal design of SHJ solar cells.

In the present review, we mainly discuss three important issues: 1) the amorphous/crystalline silicon interface passivation; 2) the Schottky barrier resulting from the work function mismatch between the (p)a-Si:H doped layer and the transparent conductive oxide layer; 3) the screening length that is required to efficiently shield the parasitic opposing band from bending originating from the work function mismatch between the (p)a-Si:H doped layer and the transparent conductive oxide layer. The numerical simulation and optimal design of SHJ solar cells are analyzed, and three strategies that may improve the solar cell performances are presented: 1) a hybrid SHJ solar cell structure with a rear heterojunction emitter and a phosphorus-diffused homojunction front surface field; 2) replacing the (p)a-Si:H doped layer by higher doping efficiency microcrystalline silicon alloys such as $\mu\text{-Si:H}$, $\mu\text{-SiO}_x\text{:H}$ or $\mu\text{-SiC}_x\text{:H}$; 3) replacing the (p)a-Si:H doped layer by higher work function transition metal oxides such as MoO_x , WO_x or VO_x . Finally, the research progress and future development of SHJ solar cells are also described.

Keywords: silicon heterojunction, solar cells, physical mechanism, optimal design

PACS: 88.40.Jj, 73.40.Lq, 81.15.Gh

DOI: 10.7498/aps.66.108801

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51361022, 61574072) and the Post-Doctor Scientific Research Fund of Jiangxi Province, China (Grant No. 2015KY12).

† Corresponding author. E-mail: lzhou@ncu.edu.cn