

# 高效硅异质结太阳能电池中空穴传输端载流子 运输机制: TCAD 仿真研究\*

林驰<sup>1) #</sup> 沈佳俊<sup>1) #</sup> 唐早波<sup>1)</sup> 林豪<sup>1) 2)</sup> 高平奇<sup>1) 2) †</sup> 韩灿<sup>1) 2) ‡</sup>

1) (中山大学材料学院, 深圳 518107)

2) (四川逸仙光伏产业创新中心有限公司, 宜宾 644002)

(2025 年 11 月 12 日收到; 2025 年 12 月 2 日收到修改稿)

硅异质结 (SHJ) 太阳能电池中空穴传输端的电接触性能调控是提升电池效率的关键挑战之一. 本文采用 TCAD 数值模拟, 通过构建多子端和少子端接触模型, 系统研究了 p 型硅薄膜 (p-layer) 接触叠层中的载流子输运行为, 重点揭示了诱导 p-n 结与寄生肖特基结的耦合作用机制及其对接触性能的影响. 研究表明, p-layer 的激活能 ( $E_{a,p}$ ) 是决定载流子输运行为的核心参数. 较低的  $E_{a,p}$  有利于在 p-layer/TCO 界面激发更有效的空穴隧穿方式 (B2BT 或 TAT-DBS), 并在 i-a-Si:H/c-Si 界面引入更适合载流子输运的能带弯曲, 这不仅显著降低了接触电阻, 还抑制了高偏压下的电子电流, 从而在宽偏压范围内维持了优异的载流子选择性. 同时, 在光学方面, 低  $E_{a,p}$  有利于拓宽透明导电氧化物 (TCO) 薄膜的材料选择窗口, 选择具有更低载流子浓度的 TCO 薄膜, 从而有效抑制 TCO 膜层的寄生吸收, 提升器件的光谱响应. 本研究阐明了空穴传输端的载流子输运机理, 明确了关键材料的调控准则, 为高性能 SHJ 太阳能电池的界面工程优化和器件设计提供了重要的理论依据与实践指导.

**关键词:** 硅异质结太阳能电池, 数值模拟, 接触电阻率, 运输机制

**DOI:** 10.7498/aps.75.20251547

**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251547

## 1 引言

硅异质结 (SHJ) 太阳能电池以晶体硅为吸收基体、硅基薄膜为载流子传输层, 基于载流子选择性接触 (CSCs) 实现高效光电转换, 是当前晶体硅太阳能电池中转换效率最高的技术路线之一. 近年来, 采用 SHJ 接触叠层结构的太阳能电池持续保持并不断刷新晶体硅太阳能电池的光电转换效率纪录, 目前认证最高效率已达 27.81%<sup>[1-4]</sup>. SHJ 接触叠层通常由氢化本征非晶硅 (i-a-Si:H) 层、掺杂硅薄膜 (n-

layer 或 p-layer) 和透明导电氧化物 (TCO) 层组成. 高质量的 CSCs 需同时具备低饱和电流密度 ( $J_0$ ) 和低接触电阻率 ( $\rho_c$ ), 从而实现高开路电压 ( $V_{OC}$ ) 与高填充因子 (FF)<sup>[5,6]</sup>.

然而, 空穴接触端的优化面临更大挑战<sup>[7-9]</sup>. 一方面, TCO/p-layer 界面存在一个寄生肖特基结<sup>[10,11]</sup>, 其电荷转移过程涉及量子隧穿、界面化学反应、缺陷态辅助输运等多重物理机制的耦合. 另一方面, n-c-Si 与 p-layer 掺杂类型相反, 在 n-c-Si 内部诱导了一个等效 p-n 结<sup>[12]</sup>, 其极性与上述寄生肖特基结相反. 这两个结互相耦合、共同作用, 使

\* 国家重点研发计划 (批准号: 2023YFB4204600)、深圳市科技重大专项 (批准号: KJZD20231023095959001)、国家自然科学基金 (批准号: 62034009)、宜宾市科技计划 (批准号: 2023JB007) 和珠海市产学研合作项目 (批准号: 2320004002352) 资助的课题.

# 同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: gaopq3@mail.sysu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: hanc3@mail.sysu.edu.cn

得载流子传输机制的分析变得复杂.

早期 SHJ 界面的研究多借鉴肖特基接触模型, 将热电子发射 (TE) 和直接隧穿 (DT) 视为主要运输机制, 并试图通过选择高功函数的 TCO 来降低空穴的肖特基势垒<sup>[13-16]</sup>. 然而实验结果表明, 即便采用高功函数 TCO, 空穴接触性能仍不理想. 直到 Muralidharan 等<sup>[11]</sup> 指出将 TCO 视为 n 型半导体更为合理, 并强调基于直接能态跃迁的带带隧穿 (B2BT) 在该界面可能占据主导地位. Procel 等<sup>[17,18]</sup> 进一步指出, 在缺陷辅助隧穿 (TAT) 机制中, 基于悬挂键 (DBS) 的 TAT 因其两性特性可提供更多复合通道, 故传输效率优于基于带尾态 (TS) 的 TAT. 此外, Luderer 等<sup>[19]</sup> 明确了和费米能级相关材料参数, 如 p-layer 的激活能 ( $E_{a,p}$ ) 和 TCO 的载流子浓度 ( $N_{TCO}$ ), 是实现低接触的主要驱动因素.

然而, 上述研究虽明确了关键材料参数, 但对于  $E_{a,p}$  和  $N_{TCO}$  如何通过调控耦合结的能带结构, 从而决定主导运输机制 (如 B2BT 与 TAT 的竞争与转换), 及其对器件综合性能 (如接触电阻、载流子选择性) 的影响规律, 尚缺乏系统的、机理层面的阐释. 空穴传输结构具备二极管特性, 传统上常采用 TLM (transfer length method) 法<sup>[20]</sup> 线性提取  $\rho_c$  以评估界面特性对器件性能的影响. 然而, TLM 需使用与掺杂硅薄膜 (如 p-layer) 相同极性的硅基底 (如 p-c-Si), 空穴作为多子传输, 因而忽略了诱导 p-n 结以及电子电流对电学性能的影响. 虽然扩展 CSM (cox and strack method) 法<sup>[21,22]</sup> 可与 Schottky 二极管特性相结合, 从少子端接触结构的  $I-V$  曲线中对数提取  $\rho_c$ , 但是当接触为非欧姆特性时,  $\rho_c$  的提取仍存在困难.

为此, 本研究借助 Sentaurus TCAD 数值模拟工具, 通过为空穴传输端分别建立多子运输的 TLM 模型与少子运输的 CSM 模型, 以实现诱导

p-n 结与寄生肖特基结的解耦分析. 模型中重点考虑了异质结界面的 B2BT 和 TAT, 以及 i-a-Si:H/n-c-Si 界面的热电子激发 (TE) 和直接隧穿 (DT) 等机制. 对于 TLM 模型, 重点关注  $E_{a,p}$  和  $N_{TCO}$  对  $\rho_c$  影响, 揭示材料参数对运输机制的作用机制. 进一步, 基于 CSM 法数值求解暗态  $I-V$  特性, 综合考虑了 p-n 结与寄生肖特基结的影响, 通过分析电压依赖的电子与空穴电流分量, 揭示各界面层的压降分布与运输性能的关联机制.

## 2 实验部分

### 2.1 TLM & CSM 模型建模仿真

图 1(a) 所示的 TLM 模型中, 空穴作为多子运输, 定义为“多子端接触结构”, 用于分析 p-layer/TCO 及 i-a-Si:H/c-Si 界面的空穴传输机制. 该结构以厚度为 250  $\mu\text{m}$  的硼掺杂晶体硅 (p-c-Si) 为基底, 其上沉积两个完全相同的接触层叠. 两个接触层叠之间的传输距离  $L$  分别设置为 200, 400, 800, 1600 和 2000  $\mu\text{m}$ , 接触层叠的宽度  $W$  固定为 1000  $\mu\text{m}$ . 每个接触层叠由 6 nm 厚的 i-a-Si:H 层、20 nm 厚的 p-layer 和 75 nm 厚的 TCO 层组成. 晶体硅的硼掺杂浓度为  $1.71 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

图 1(b) 所示的 CSM 模拟模型为其半截面 (完整结构由旋转对称获得), 定义为“少子端接触结构”, 旨在将诱导 p-n 结与电子电流的影响纳入分析. 该模型以厚度为 125  $\mu\text{m}$  的磷掺杂晶体硅 (n-c-Si) 为基底, 其上沉积半径  $R$  为 3600  $\mu\text{m}$  的圆盘形接触层叠. 该层叠由 6 nm 厚的 i-a-Si:H 层、8 nm 厚的 p-layer 和 75 nm 厚的 TCO 层组成. 晶体硅的磷掺杂浓度设置为  $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .

模拟中所使用的物理模型、参数以及各传输层的材料参数均在 2.3 节模拟参数中给出.

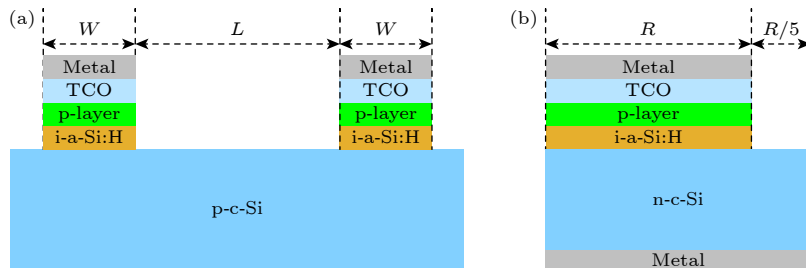


图 1 多子端和少子端接触模型 (a) TLM 结构的横截面图; (b) CSM 结构的半横截面图

Fig. 1. Majority and minority-carrier contact models: (a) Cross-sectional view of the TLM structure; (b) half-cross-sectional view of the CSM structure.

## 2.2 p 型硅薄膜禁带缺陷能态分布

本模拟中 p-layer 的缺陷态分布参数 (如图 2 所示), 包括 Urbach 带尾态能量 (价带 120 meV, 导带 80 meV)、高斯分布的悬挂键缺陷密度 ( $1.31 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1}$ ) 及其峰位 (约 1.1—1.2 eV), 主要参考了广泛报道的氢化非晶硅/纳米晶硅 (p-a-Si:H/p-nc-Si:H) 薄膜的实验表征结果及在同类 TCAD 模拟研究中采用的典型参数集<sup>[23,24]</sup>. 这些参数的设定, 旨在合理地反映 p-layer 中存在的高密度缺陷态, 特别是其对载流子输运有显著影响的带尾态 (TS) 和中性悬挂键 (DBS) 的特性.

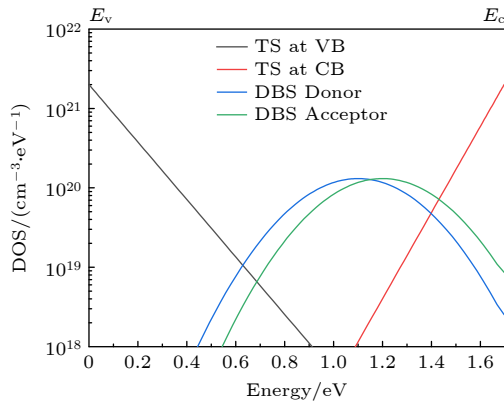


图 2 p-layer 禁带缺陷能态分布

Fig. 2. Distribution of defect energy states within the band gap of p-layer.

## 2.3 物理模型和材料参数

本模拟的所有计算均在室温 (300 K) 条件下进行. 同时, 模型中假设各层材料的掺杂浓度均为空间均匀分布, 各接触层材料的禁带宽度设定为固定值, 以聚焦于研究材料本征参数 ( $E_{a,p}$ ,  $N_{TCO}$ ) 及界面特性对载流子输运的核心影响. 对于 c-Si 材料, 本征复合采用 Richter 模型<sup>[25]</sup>, 迁移率采用 Klaassen 模型<sup>[26]</sup>, 载流子统计遵循 Fermi-Dirac 分布, SRH 体寿命设定为 10 ms, 表面复合速率设为  $0.1 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$ . 表 1 给出本模拟工作中所用到的各功能层材料参数. 为准确揭示不同参数下的能带结构演化规律, 文中所有能带图 (图 3、图 5—图 8) 均以真空能级为能量基准进行绘制, 以实现能带对齐情况的均一化比较.

## 3 结果与讨论

如图 3 所示, 对比  $E_{a,p}=400 \text{ meV}$  (图 3(a))

表 1 本模拟工作中的各功能层材料参数

Table 1. Material parameters of each functional layer in our simulations.

材料参数	i-a-Si:H	p-layer	TCO
电子亲和能/eV	3.9	3.9	4.9
禁带宽度/eV	1.7	1.7	3.7
导带有效状态密度/ $(10^{18} \text{ cm}^{-3})$	200	200	4
价带有效状态密度/ $(10^{19} \text{ cm}^{-3})$	20	20	1.7
电子/空穴迁移率/ $(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	20/4	25/5	160/40
隧穿质量/ $m_0$	0.1 <sup>[27]</sup>	0.1 <sup>[27]</sup>	—
Urbach 能量 (价带带尾态)/meV	50	120	—
Urbach 能量 (导带带尾态)/meV	35	80	—
Urbach 带尾态前因子/ $(10^{21} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1})$	1.88	2	—
Urbach 带尾态 $e/h$ 俘获截面/ $(10^{-16} \text{ cm}^2)$	7	7	—
Gaussian 峰值缺陷密度/ $(10^{16} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1})$	1.38	13100	—
Gaussian 施主峰位置/eV	0.89	1.1	—
Gaussian 受主峰位置/eV	1.09	1.2	—
Gaussian 施主 $e/h$ 俘获截面/ $(10^{-14} \text{ cm}^2)/(10^{-15} \text{ cm}^2)$	3/3	3/3	—
Gaussian 受主 $e/h$ 俘获截面/ $(10^{-15} \text{ cm}^2)/(10^{-14} \text{ cm}^2)$	3/3	3/3	—

与  $E_{a,p}=100 \text{ meV}$  (图 3(b)) 的能带结构可知: 较低的  $E_{a,p}$  通过提升 p-layer 的费米能级 ( $E_f$ ), 调制了其与其 TCO 之间的功函数差, 从而在界面处诱发出更强的内建电势与能带弯曲. 这具体表现为 p-layer 价带顶 ( $E_V$ ) 在界面处更显著的向上弯曲, 致使空穴向 TCO 输运的势垒宽度与高度均显著降低. 此外, 这一增强的能带弯曲效应也延伸至 i-a-Si:H/c-Si 界面 (见图 3 插图), 使其能带更为陡峭, 这有助于提升该处的内建电场, 从而增强空穴的提取能力.

针对 p-layer/TCO 界面的载流子输运机制, p-layer 价带空穴与 TCO 导带电子的复合行为受到界面特性的调控. 如 Procel 等<sup>[17]</sup> 的研究指出, 界面  $\rho_c$  值与主导载流子输运机制及能带对齐方式密切相关, 而且更低的空穴输运势垒, 有利于 B2BT 主导的载流子输运——这是目前公认的最高效隧穿机制. 而对于高  $E_{a,p}$ , p-layer/TCO 界面则以陷阱辅助隧穿 (TAT) 为主, 该机制效率通常低于 B2BT, 导致界面  $\rho_c$  值显著升高 (图 4 的结果也可证明).

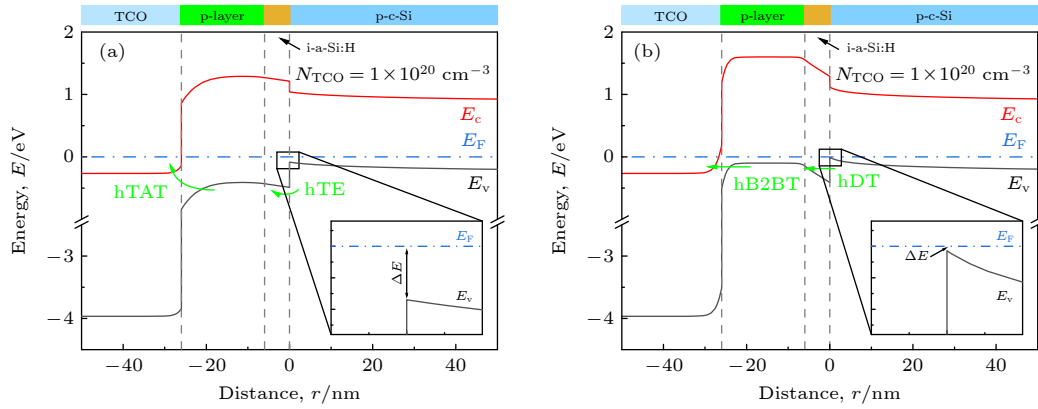


图3 中等 TCO 载流子浓度时 ( $N_{\text{TCO}} = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ),  $E_{\text{a,p}}$  对多子端接触能带结构的影响 (a)  $E_{\text{a,p}} = 400 \text{ meV}$ ; (b)  $E_{\text{a,p}} = 100 \text{ meV}$   
 Fig. 3. Influence of  $E_{\text{a,p}}$  on the energy band structure of the majority-carrier contact at a moderate TCO carrier concentration ( $N_{\text{TCO}} = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ): (a)  $E_{\text{a,p}} = 400 \text{ meV}$ ; (b)  $E_{\text{a,p}} = 100 \text{ meV}$ .

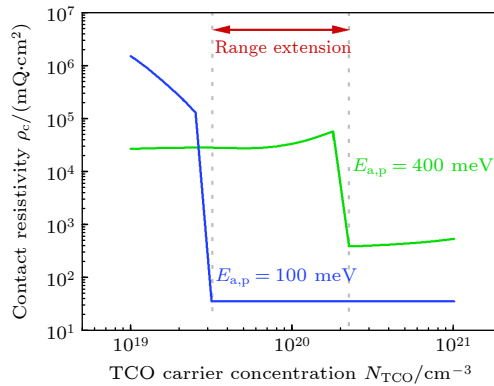


图4 不同  $E_{\text{a,p}}$  条件下,  $N_{\text{TCO}}$  对接触电阻率的影响  
 Fig. 4. Influence of  $N_{\text{TCO}}$  on the contact resistivity under different  $E_{\text{a,p}}$  conditions.

在 i-a-Si:H/c-Si 界面, 低  $E_{\text{a,p}}$  在 c-Si 表面形成了更强的空穴积累效应, 增大了空穴与电子浓度差, 从而提升了电学钝化质量. 此外, 增强的能带弯曲还在 i-a-Si:H/c-Si 界面形成了更低且更陡峭的能垒, 促进了空穴通过直接隧穿 (DT) 在异质结电池中的收集效率. 这两点也在林豪等<sup>[1]</sup>和 Wang 等<sup>[2]</sup>的研究中得到印证, 空穴传输端采用低  $E_{\text{a,p}}$  的 p 型氢化纳米晶硅 (p-nc-Si:H), 最终使该接触结构获得更低的饱和电流密度 ( $J_0$ ) 和接触电阻率 ( $\rho_c$ ), 进而获得了 86.59% 的超高填充因子 (FF).

如图 4 所示, 在  $E_{\text{a,p}}$  的基础上引入了  $N_{\text{TCO}}$  对接触电阻率 ( $\rho_c$ ) 的影响. 随着  $N_{\text{TCO}}$  增大, 低  $E_{\text{a,p}}$  的  $\rho_c$  逐渐减小, 并在  $N_{\text{TCO}}$  约达  $2.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  时出现转折, 此后  $\rho_c$  趋于稳定; 而在高  $E_{\text{a,p}}$  条件下, 虽然  $\rho_c$  随  $N_{\text{TCO}}$  增大仍出现转折, 但变化趋势显著不同于低  $E_{\text{a,p}}$  情形,  $\rho_c$  在转折前后随  $N_{\text{TCO}}$  增大反而呈上升趋势. 由图 4 可知, 低  $E_{\text{a,p}}$  时, B2BT

更易实现, 且接触电阻率明显更低. 对  $N_{\text{TCO}}$  更低的要求, 可以减小寄生吸收, 同时拓宽 TCO 选择范围.

为探究造成此现象的原因, 提取  $E_{\text{a,p}} = 100 \text{ meV}$  时, 两个极端  $N_{\text{TCO}}$  值 ( $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ,  $1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ ) 的暗态平衡能带图 (如图 5 所示). 在  $\rho_c$  转折点之前, 其典型能带结构如图 5(a) 所示. 在 p-layer/TCO 界面处, 电子和空穴在导带和价带上面临较高的传输势垒, 结合图 2 缺陷态分布分析, 此时载流子输运主要依赖 p-layer 价带附近的 TS 实现 TAT. 随着  $N_{\text{TCO}}$  增大, TCO 的空间电荷区收缩并且其能带弯曲量减小且变得更为陡峭, 而 p-layer 的空间电荷区向内部扩展的同时, 能带弯曲量增大并在原有基础上叠加一段尖锐弯曲. 这一变化导致 TCO 导带电子浓度升高、隧穿距离缩短, 与导带电子对齐的缺陷能态数量显著增加 (尤其在靠近 p-layer 价带处, 缺陷态密度呈指数增长), 从而增强了空穴的 TAT 过程, 促使  $\rho_c$  降低.

当  $N_{\text{TCO}}$  增大至某一临界值时, TCO 导带能级降至 p-layer 价带以下, 空穴的 B2BT 被激活, 使界面隧穿电流急剧增加, 导致图 4 中  $\rho_c$  的骤降. 然而如图 5(b) 所示, B2BT 引发的隧穿电流不会无限增长, 最终会受到两方面限制: 第一, 随费米能级进一步偏离价带顶, 可参与隧穿的空穴浓度呈指数下降, 即使  $N_{\text{TCO}}$  继续增大, 可隧穿空穴数量增加有限; 第二, p-c-Si/i-a-Si:H 界面处的空穴传输也会制约整个传输结构的电流, 从而限制 B2BT 隧穿电流的持续增长.

进一步, 为探究  $E_{\text{a,p}} = 400 \text{ meV}$  时  $\rho_c$  转折前后的反常上升原因, 我们通过分析其能带结构

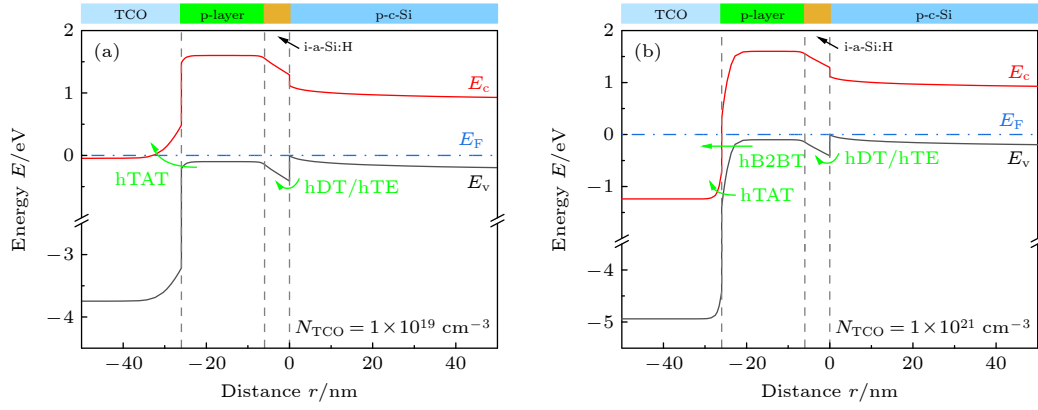

 图 5  $E_{a,p} = 100$  meV 时, 多子端接触结构的暗态平衡能带图 (a)  $N_{TCO} = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ; (b)  $N_{TCO} = 1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ 

Fig. 5. Equilibrium energy band diagram of the majority-carrier contact structure under dark conditions for  $E_{a,p} = 100$  meV: (a)  $N_{TCO} = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ; (b)  $N_{TCO} = 1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ .

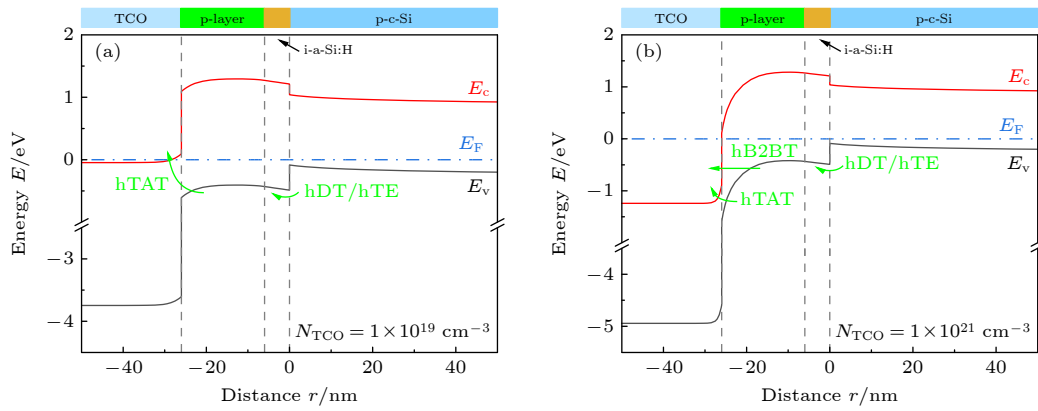

 图 6  $E_{a,p} = 400$  meV 时, 多子端接触结构在暗态下的平衡能带图 (a)  $N_{TCO} = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ; (b)  $N_{TCO} = 1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ 

Fig. 6. Equilibrium energy band diagram of the majority-carrier contact structure under dark conditions for  $E_{a,p} = 400$  meV: (a)  $N_{TCO} = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ; (b)  $N_{TCO} = 1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ .

(如图 6 所示) 发现: 相同空间电荷量下, 高  $E_{a,p}$  的 p-layer 空间电荷区更宽, 承担更多能带弯曲量. 因此, 当  $N_{TCO}$  增大时, p-layer 的能带弯曲加剧, 导致界面附近空穴浓度下降, 削弱 TAT 过程. 即便在 B2BT 主导后, 该能带弯曲加剧同样会抑制 B2BT 效率, 从而引发  $\rho_c$  在转折前后的反常上升趋势.

除 B2BT 外, 我们还希望探究  $E_{a,p}$  和 p-layer/TCO 界面 TAT 的关联. 如图 7 所示, 我们选择在低  $N_{TCO}$  条件下, 变化  $E_{a,p}$ . 此时, B2BT 机制无法启动, 载流子输运由 TAT 主导, 这为研究  $E_{a,p}$  对 p-layer/TCO 界面的 TAT 的影响提供了窗口. 如图 7(a) 所示, 在此条件下,  $\rho_c$  随  $E_{a,p}$  减小呈现先降后升的变化, 这反映了多种物理因素的竞争效应.

1) 空穴浓度与隧穿距离.  $E_{a,p}$  减小会提高 p-layer 的空穴浓度, 有利于 TAT; 但同时会引起 TCO 侧能带弯曲加剧, 增大隧穿距离, 进而抑制

TAT. 这两种相反效应的竞争是图 7(a) 中  $\rho_c$  出现谷值的原因之一.

2) 缺陷能级分布. 更为关键的因素是费米能级在禁带中的移动改变了有效参与 TAT 的缺陷能级类型. 当费米能级位于 TS 与 DBS 交界处时 (图 2 和图 7(c)), TAT 能同时得到两种缺陷能级的支持, 效率最高, 对应  $\rho_c$  的谷值. 当  $E_{a,p}$  偏大或偏小导致费米能级远离此交界时, 仅有一种缺陷能级主导 TAT, 传输效率下降,  $\rho_c$  随之增大. 此外, 在  $E_{a,p}$  极大或极小时, TAT 还会分别受限于空穴浓度不足或隧穿距离过大, 即使特定缺陷态密度有所增加, 也难以补偿其对隧穿电流的抑制作用.

如图 8 所示, 为全面评估空穴端传输机制, 本研究采用了包含电压变化参数的 CSM 模型, 引入了 n-c-Si 内部的诱导 p-n 结, 分别提取并分析电子电流与空穴电流对总电流的贡献. 高  $E_{a,p}$  会引发

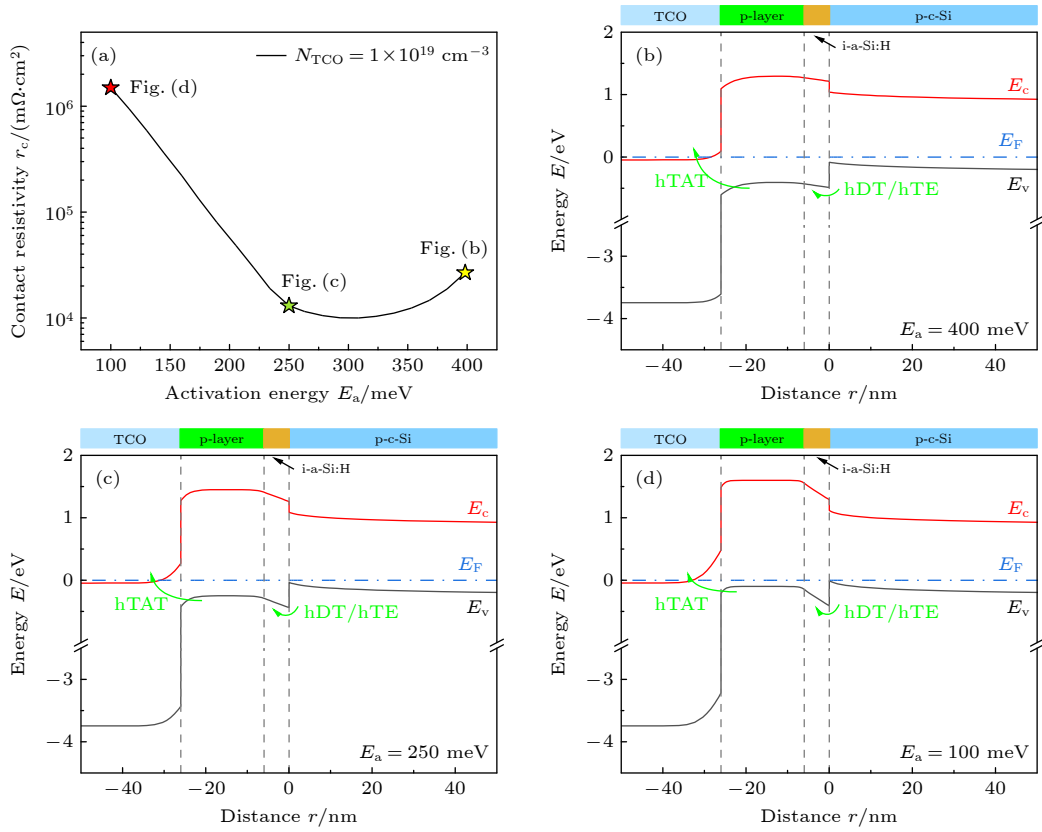


图 7  $N_{\text{TCO}} = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  时,  $E_{a,p}$  对多子端接触结构输运性能影响 (a) 接触电阻率随  $E_{a,p}$  的变化; (b)–(d)  $E_{a,p}$  分别为 400, 250 和 100 meV 时的暗态平衡能带图

Fig. 7. Influence of  $E_{a,p}$  on the transport properties of the majority-carrier contact structure at  $N_{\text{TCO}} = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ : (a) Contact resistivity as a function of  $E_{a,p}$ ; (b)–(d) dark equilibrium band diagram at  $E_{a,p}$  values of 400, 250, and 100 meV, respectively.

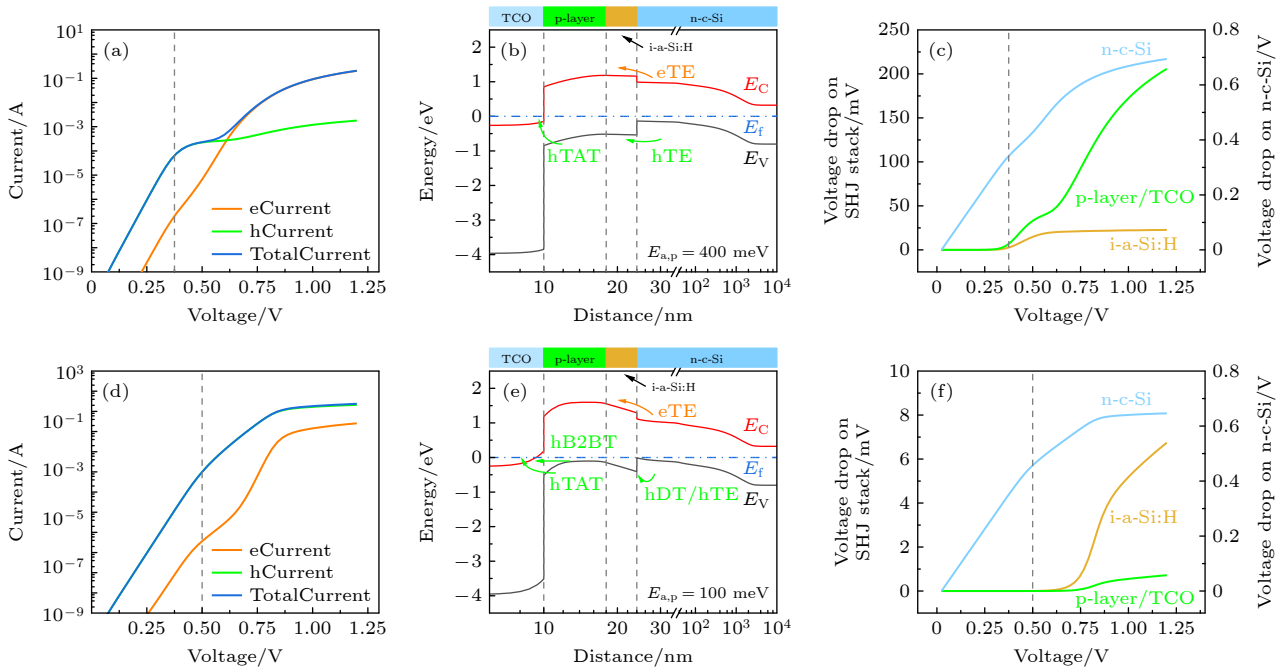


图 8 少子端接触结构中的电压依赖输运机制  $E_{a,p} = 400 \text{ meV}$  时 (a)  $I$ - $V$  曲线, (b) 暗态平衡能带图, (c) 层间电压降;  $E_{a,p} = 100 \text{ meV}$  时 (d)  $I$ - $V$  曲线, (e) 暗态平衡能带图, (f) 层间电压降

Fig. 8. Voltage-dependent transport in the minority-carrier contact. (a)–(c)  $E_{a,p} = 400 \text{ meV}$ : (a)  $I$ - $V$  curves; (b) dark equilibrium band diagram; (c) layer-specific voltage drops. (d)–(f)  $E_{a,p} = 100 \text{ meV}$ : (d)  $I$ - $V$  curves; (e) dark equilibrium band diagram; (f) layer-specific voltage drops.

S形  $I-V$  扭结, 这是由高偏压下空穴电流饱和而电子电流持续主导所致, 该效应严重损害了少子端接触的空穴收集能力. 结合图 8(b) 的输运机制与图 8(c) 的压降分布, 该现象的成因如下: 在 n-c-Si 上沉积的接触层叠, 电子的输运主要通过 TE. 而  $E_{a,p}$  增大导致 p-layer 与 n-c-Si 及 TCO 的功函数差值减小. 这一方面使 i-a-Si:H/n-c-Si 界面处的势垒变为方形, 空穴传输由 TE 主导; 另一方面, p-layer/TCO 界面处的能带弯曲趋于平缓, 抑制了 B2BT 的发生, 使得 TAT 成为主导机制 (图 6(a) 中空穴电流的饱和也印证了这一点). 于是在偏压低于 0.375 V 时, 电压主要施加于 n-c-Si 上. 随电流增大, 空穴输运相继受到 DT 和 TAT 的限制, 导致 i-a-Si:H 层和 p-layer/TCO 界面压降增大, 最终因 TAT 的限制使空穴电流饱和. 然而, 热电子激发过程在此过程中几乎未受影响, 电子电流得以持续增大并占据主导地位.

相反如图 8(d) 所示, 在低  $E_{a,p}$  时, 空穴电流传输充分, 说明 p-layer/TCO 界面处的空穴传输由 B2BT 主导, 呈现欧姆接触特性.  $E_{a,p}$  减小导致 i-a-Si:H/n-c-Si 界面处的势垒变薄 (如图 8(a)), 此处的空穴传输变为 DT 主导; 而热电子激发的势垒增大, 保证了高载流子选择性, 减少了复合损失.

## 4 结 论

本研究通过 TCAD 数值模拟, 系统探讨了硅异质结太阳能电池空穴传输端的载流子输运机制, 我们明确了降低  $E_{a,p}$  在高效硅异质结太阳能电池空穴传输端中的多维影响: 1) 对于 p-layer 本身, 降低其薄膜电导率; 2) 在 p-layer/TCO 界面, 更低的空穴输运势垒, 有利于建立高效输运机制 B2BT 或 TAT-DBS; i-a-Si:H/c-Si 界面更陡峭的势垒, 有利于发生更高效的 DT, 二者都可以降低接触电阻; 3) c-Si 表面形成了更强的空穴积累效应, 抑制了高偏压下电子电流的持续增长, 保持了载流子选择性. 此外, 低  $E_{a,p}$  可以大大拓宽 TCO 膜层材料的选择范围, 有望采用低  $N_{TCO}$  的 TCO 材料实现高效载流子输运, 从而在改善器件电学性能的同时, 提升其光学响应. 本工作结论在近年来报道的高效硅异质结太阳能电池中均可得到验证, 对于深化其界面工程研究具有重要的理论参考价值, 也将为构筑下一代高效太阳能电池提供设计依据.

本研究聚焦于室温、暗态条件下的机理分析, 温度、光照变化会显著影响载流子的热激发和复合过程, 从而改变器件的绝对性能参数. 然而, 本文所揭示的核心物理图像主要由界面能带对齐和量子隧穿效应决定, 这些因素对温度在合理范围内的变化相对不敏感. 深入分析温度、光照、掺杂分布梯度等边界条件对定量性能的影响, 是未来面向具体应用场景优化的重要方向.

## 参考文献

- [1] Lin H, Yang M, Ru X, Wang G, Yin S, Peng F, Hong C, Qu M, Lu J, Fang L, Han C, Procel P, Isabella O, Gao P, Li Z, Xu X 2023 *Nat. Energy* **8** 789
- [2] Wang G, Su Q, Tang H, Wu H, Lin H, Han C, Wang T, Xue C, Lu J, Fang L, Li Z, Xu X, Gao P 2024 *Nat. Commun.* **15** 8931
- [3] Wu H, Ye F, Yang M, Luo F, et al. 2024 *Nature* **635** 604
- [4] Wang G, Yu M, Wu H, et al. 2025 *Nature* **647** 369
- [5] Allen T G, Bullock J, Yang X, Javey A, De Wolf S 2019 *Nat. Energy* **4** 914
- [6] Feldmann F, Bivour M, Reichel C, Hermle M, Glunz S W 2014 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **120** 270
- [7] Sun Z, Chen X, He Y, Li J, Wang J, Yan H, Zhang Y 2022 *Adv. Energy Mater* **12** 2200015
- [8] Long W, Yin S, Peng F, Yang M, Fang L, Ru X, Qu M, Lin H, Xu X 2021 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **231** 111291
- [9] Yuan H Z, Chen X L, Liang B Q, Sun A X, Wang X J, Zhao Y, Zhang X Z 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 047801 (in Chinese) [袁赫泽, 陈新亮, 梁柄权, 孙爱鑫, 王雪骄, 赵颖, 张晓丹 2025 *物理学报* **74** 047801]
- [10] Schulze T F, Korte L, Conrad E, Schmidt M, Rech B 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 023711
- [11] Muralidharan P, Leilaoui M A, Weigand W, Holman Z C, Goodnick S M, Vasileska D 2020 *IEEE J. Photovoltaics* **10** 363
- [12] Varache R, Kleider J P, Gueunier-Farret M E, Korte L 2013 *Mater. Sci. Eng., B* **178** 593
- [13] Madani Ghahfarokhi O, Von Maydell K, Agert C 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 113901
- [14] Bivour M, Schröer S, Hermle M 2013 *Energy Procedia* **38** 658
- [15] Ritzau K U, Bivour M, Schröer S, Steinkemper H, Reinecke P, Wagner F, Hermle M 2014 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **131** 9
- [16] Bivour M, Reichel C, Hermle M, Glunz S W 2012 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **106** 11
- [17] Procel P, Xu H Y, Saez A, Ruiz - Tobon C, Mazzarella L, Zhao Y F, Han C, Yang G T, Zeman M, Isabella O 2020 *Prog Photovoltaics* **28** 935
- [18] Procel P, Yang G, Isabella O, Zeman M 2018 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **186** 66
- [19] Luderer C, Tutsch L, Messmer C, Hermle M, Bivour M 2021 *IEEE J. Photovoltaics* **11** 329
- [20] Lachenal D, Baetzner D, Frammelsberger W, Legradic B, Meixenberger J, Papet P, Strahm B, Wahli G 2016 *Energy Procedia* **92** 932
- [21] Cox R H, Strack H 1967 *Solid-State Electron.* **10** 1213
- [22] Wang W, Lin H, Yang Z, Wang Z, Wang J, Zhang L, Liao

- M, Zeng Y, Gao P, Yan B, Ye J 2019 *IEEE J. Photovoltaics* **9** 1113 [25] Richter A, Werner F, Cuevas A, Schmidt J, Glunz S W 2012 *Energy Procedia* **27** 88
- [23] Gao T, Geng Q, Gao Z, Li Y, Chen L, Li M 2021 *ACS Appl. Energy Mater.* **4** 12543 [26] Klaassen D B M 1992 *Solid-State Electron.* **35** 953
- [24] Rached D, Rahal W L 2020 *Optik* **223** 165575 [27] Shannon J M, Nieuwesteeg K J B M 1993 *Appl. Phys. Lett.* **62** 1815

# Unraveling carrier transport behavior at hole contact for high-performance silicon heterojunction solar cells: A TCAD simulation study\*

LIN Chi<sup>1) #</sup> SHEN Jiajun<sup>1) #</sup> TANG Hanbo<sup>1)</sup> LIN Hao<sup>1) 2)</sup>  
GAO Pingqi<sup>1) 2) †</sup> HAN Can<sup>1) 2) ‡</sup>

1) (School of Materials, Sun Yat-sen University, Shenzhen 518107, China)

2) (Sichuan Yat-sen Photovoltaic Industry Innovation Center Co., Ltd., Yibin 644002, China)

( Received 12 November 2025; revised manuscript received 2 December 2025 )

## Abstract

Modulation of electrical contact properties at the hole-selective contact represents a critical challenge for enhancing the efficiency of silicon heterojunction (SHJ) solar cells, particularly due to the complex carrier transport in the induced p-n junction at the p-layer/TCO interface. In this work, we systematically investigate the carrier transport behavior within the hole contact stack by employing TCAD numerical simulations. Specifically, both the majority- and minority-carrier analyzing models are built, based on the typical transfer length method (TLM) and cox and strack method (CSM) architectures. Our findings reveal that the activation energy ( $E_{a,p}$ ) of p-layer is a decisive parameter governing the carrier transport dynamics. A lower  $E_{a,p}$  (e.g., 100 meV) significantly reduces the hole transport barrier at the p-layer/TCO interface, promoting dominant band-to-band tunneling (B2BT) or dangling-bond-assisted trap-assisted tunneling (TAT-DBS), while simultaneously optimizing band bending at the i-a-Si:H/c-Si interface to improve hole collection efficiency. These synergistic effects not only significantly reduce the contact resistivity but also suppress the parasitic electron current under high forward bias, thereby maintaining excellent carrier selectivity over a wide voltage range. From an optical perspective, a lower  $E_{a,p}$  broadens the selection window for transparent conductive oxide (TCO) materials, as it enables the use of TCO films with lower carrier concentration, thereby effectively reducing parasitic absorption. This study clarifies the carrier transport mechanism at the hole-selective contact and establishes key material design criteria, providing crucial theoretical guidance and practical strategies for the interface engineering and performance optimization of next-generation high-efficiency SHJ solar cells, as supported by experimental trends in recent high-efficiency devices.

**Keywords:** silicon heterojunction solar cells, numerical simulations, contact resistivity, transport mechanisms

DOI: [10.7498/aps.75.20251547](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251547)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251547](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251547)

\* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2023YFB4204600), the Shenzhen Science and Technology Program, China (Grant No. KJZD20231023095959001), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62034009), the Yibin Science and Technology Program, China (Grant No. 2023JB007), and the Zhuhai Industry-University-Research Cooperation Project, China (Grant No. 2320004002352).

# These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: [gaopq3@mail.sysu.edu.cn](mailto:gaopq3@mail.sysu.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [hanc3@mail.sysu.edu.cn](mailto:hanc3@mail.sysu.edu.cn)

高效硅异质结太阳能电池中空穴传输端载流子输运机制: TCAD仿真研究

林驰 沈佳俊 唐早波 林豪 高平奇 韩灿

**Unraveling carrier transport behavior at hole contact for high-performance silicon heterojunction solar cells: A TCAD simulation study**

LIN Chi SHEN Jiajun TANG Hanbo LIN Hao GAO Pingqi HAN Can

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 050702 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251547

CSTR: 32037.14.aps.75.20251547

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251547>

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

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

硒化亚锗异质结太阳能电池模拟研究

Numerical simulation of germanium selenide heterojunction solar cell

物理学报. 2023, 72(24): 248801 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231220>

晶硅太阳能电池钝化层技术研究进展

Research progress of passivation layer technology for crystalline silicon solar cells

物理学报. 2025, 74(4): 047801 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241292>

基于Shockley-Queisser模型的异质结太阳能电池极限效率计算

Shockley-Queisser theory based calculation of efficiency limit of heterojunction solar cells

物理学报. 2025, 74(3): 038801 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20240941>

不同环境下硫化镉/铜基薄膜异质结退火对太阳能电池性能调控

Regulation of solar cell performance by cadmium sulfide/copper-based thin film heterojunction annealing under different atmospheres

物理学报. 2023, 72(8): 088802 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230105>

激光诱导烧结对TOPCon太阳能电池接触性能影响

Influence of laser induced sintering on contact performance of TOPCon solar cells

物理学报. 2024, 73(24): 248801 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241372>

双吸收层钙钛矿异质结策略提升全钙钛矿叠层太阳能电池的光伏性能

Dual-absorption-layer heterojunction strategy for enhancing photovoltaic performance of all-perovskite tandem solar cell

物理学报. 2025, 74(14): 148802 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250372>