

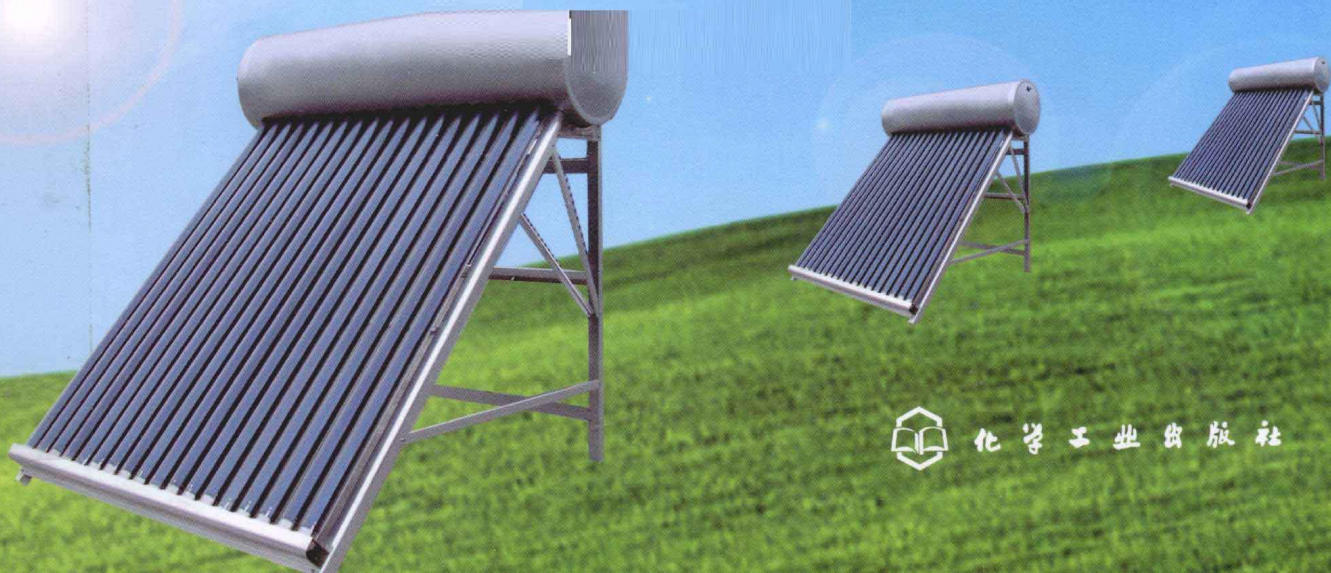


新能源系列 —— 光伏应用专业规划教材

TAIYANGNENG  
GUANGFU  
LIHUA JICHU

# 太阳能光伏 理化基础

黄建华 主编 张存彪 张培明 副主编




化学工业出版社



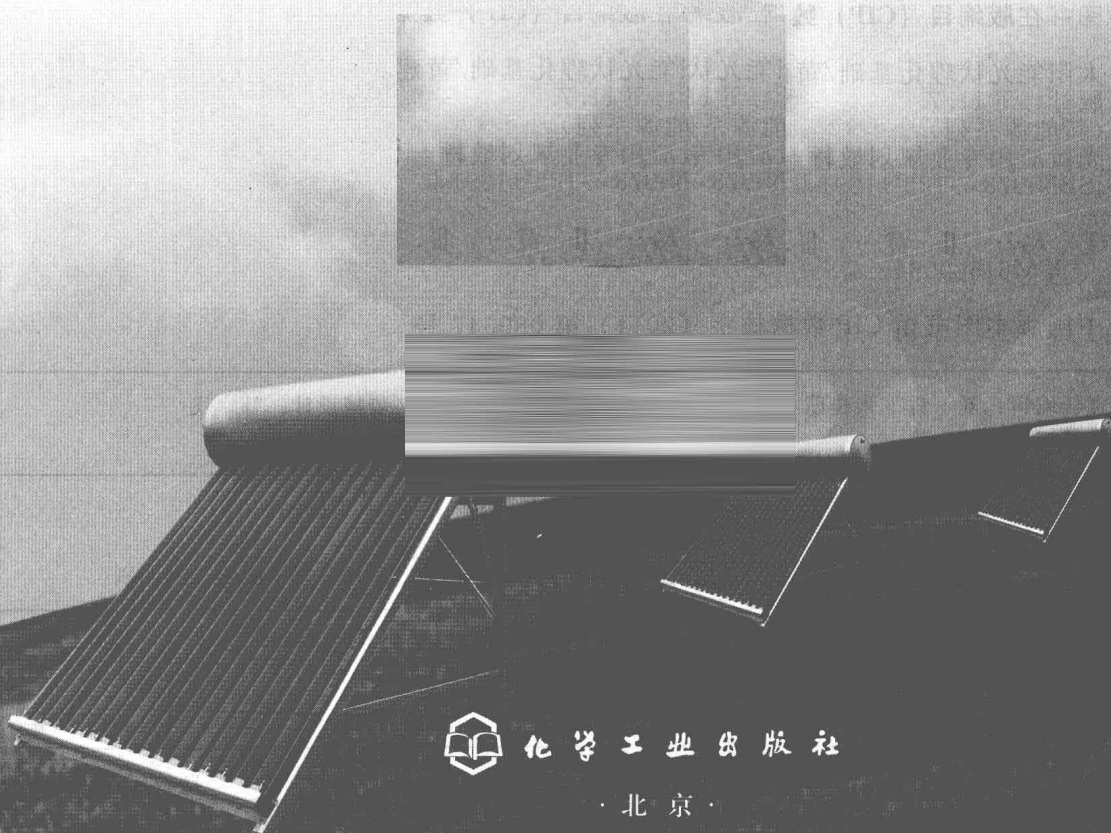


新能源系列 —— 光伏应用专业规划教材

 TAIYANGNENG  
GUANGFU  
LIHUA JICHU

# 太阳能光伏 理化基础

黄建华 主编 张存彪 张培明 副主编



化学工业出版社

· 北京 ·

本教材以硅太阳能电池的工艺为基础，重点介绍了晶体的性质、半导体材料核外电子的排布规则、价键理论、材料中出现的缺陷、半导体的基础知识，最后从光伏发电的角度介绍了晶体等各方面的性能对光伏发电的影响，并以硅材料为例，介绍了完整的光伏产业链，使读者在掌握光伏基础理论知识的同时，对光伏产业链有个系统的了解。

本书可作为高等院校及职业院校太阳能光伏专业学生的教材，同时可作为企业对员工的岗位培训教材，也可以作为相关专业的工程技术人员参考书。

### 图书在版编目 (CIP) 数据

太阳能光伏理化基础/黄建华主编.—北京:化学工业出版社, 2011.7  
(新能源系列)  
光伏应用专业规划教材  
ISBN 978-7-122-11291-0

I. 太… II. 黄… III. 太阳能发电-物理化学-教材  
IV. ①TM615②064

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 089547 号

---

责任编辑: 刘 哲 张建茹  
责任校对: 陈 静

装帧设计: 韩 飞

---

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)  
印 装: 大厂聚鑫印刷有限责任公司  
787mm×1092mm 1/16 印张 10 $\frac{1}{4}$  字数 248 千字 2011 年 7 月北京第 1 版第 1 次印刷

---

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899  
网 址: <http://www.cip.com.cn>  
凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

---

定 价: 23.00 元

版权所有 违者必究

# 编委会人员名单

主 编：黄建华

副主编：张存彪 张培明

参 编：黄建华 张存彪 张培明 唐荣梅

李 强 陈 玲 肖友鹏 傅 瑶

赵 越 牛玲玲 李淑芸

主 审：廖东进 文其知

# 前 言

太阳能光伏理论基础  
AIYAN NENG LIAO FU

根据预测，太阳能光伏发电在 21 世纪会占据世界能源消费的重要席位，不但要替代部分常规能源，而且将成为世界能源供应的主体。尽管金融危机对全球光伏产业的发展产生了重大的冲击与影响，但这种冲击估计只是短期的影响。从长远来看，光伏产业属于新兴的朝阳产业，具有光明的发展前景。目前世界光伏产业以 31.2% 的年平均增长率高速发展，位于全球能源发电市场增长率的首位，预计到 2040 年光伏发电将占世界发电总量的 20% 以上，到 2050 年，光伏发电将成为全球重要的能源支柱产业。各国根据这一趋势，纷纷出台有力政策或指定发展计划，在太阳能发电的价格、税收、发展基金等方面给予较大优惠，使光伏市场呈现出蓬勃发展的格局。由光伏产业热潮催生了上、中、下游光伏企业遍地开花，一批新兴光伏企业不断扩产，各地多晶硅、单晶硅电池项目纷纷上马，使得光伏产业呈现出繁华现象。目前，中国已经有各种光伏企业超过 1000 家。2007 年，可以说是中国光伏材料产业里程碑式的一年，中国太阳能电池生产量为 1088MW，超过了日本和欧洲，成为世界第一大太阳能电池生产国。

如何更好地发展太阳能光伏事业，人才培养是实现产业可持续发展的关键。光伏产业的快速发展与人才培养相对落后的矛盾，造成了越来越多的光伏企业人力资源紧张。人才培养的基础是课程，而教材对支撑课程质量举足轻重。光伏作为新型产业，专业也基本为新开设的，缺乏相应的配套教材可借鉴参考，编委会根据光伏产业的基础理论知识，依托多家光伏企业，共同编写了本教材。

本教材以硅太阳能电池的工艺为基础，先后介绍了晶体的性质、半导体材料核外电子的排布规则、材料的价键理论、材料中出现的缺陷、半导体的基础知识，最后从光伏发电的角度介绍晶体等各方面的性能对光伏发电的影响，并以硅材料为例，介绍了完整的光伏产业链，使读者在掌握光伏基础理论知识的同时，对光伏产业链有个系统的了解。利于读者从事光伏方面的研发工作。本教材在编写中，

理论知识方面涉及较多，读者可选择性地学习（带※部分可不作要求）。

本书可以作为高职高专太阳能光伏专业学生的教材，同时可作为企业对员工的岗位培训教材，也可以作为相关专业的工程技术人员参考书。

本书由黄建华主编，张存彪、张培明担任副主编，编写分工为：张培明编写第1章，唐荣梅编写第2章，李强编写第3章，陈玲编写第4章，肖友鹏、牛玲玲共同编写第5章，黄建华、傅瑶共同编写第6、7章。

本书由浙江衢州职业技术学院廖东进老师审阅第1章至第4章，湖南理工职业技术学院文其知老师审阅第5章至第7章。两位老师在审稿过程中提出了许多宝贵意见和建议，在此表示衷心的感谢。

教材的开发是一个循序渐进的过程，本教材只是一个起步，限于编者水平有限，经验不足，在编写过程中难免会有疏漏之处，竭诚欢迎广大师生和读者提出宝贵意见，使本书不断改进、不断完善。在教材中引用了一些资料，在此对有关专家学者和单位一并表示感谢！

**编者**

**2011年4月**

# 目 录

太阳能光伏理化基础  
TAIYANGNENG GUANGFU LIXUA JICHU

<b>第 1 章</b>	<b>晶体的基本知识</b>	<b>1</b>
1.1	晶体与非晶体 .....	1
1.2	晶体的特性 .....	2
1.3	常见晶体的类型 .....	7
1.4	空间点阵和晶胞 .....	9
1.5	倒格子 .....	24
	本章小结 .....	30
	思考题 .....	30
<b>第 2 章</b>	<b>原子结构</b>	<b>31</b>
2.1	氢原子光谱与玻尔理论 .....	31
2.2	微观粒子运动的规律 .....	35
2.3	原子核外电子排布 .....	40
	本章小结 .....	45
	思考题 .....	45
<b>第 3 章</b>	<b>化学键与分子结构</b>	<b>46</b>
3.1	离子键理论 .....	47
3.2	共价键 .....	52
3.3	金属键理论 .....	59
	本章小结 .....	63
	思考题 .....	63
<b>第 4 章</b>	<b>晶体缺陷</b>	<b>64</b>
4.1	概述 .....	64
4.2	晶体缺陷 .....	65
	本章小结 .....	77
	思考题 .....	77

**第 5 章 半导体物理** 78

5.1 半导体的特性	78
5.2 热平衡载流子的统计分布	88
5.3 非平衡载流子	97
5.4 载流子的输运	107
5.5 PN 结及其能带图	113
5.6 PN 结特性	117
本章小结	122
思考题	122

**第 6 章 太阳能电池基础** 123

6.1 太阳能电池原理介绍	123
6.2 太阳能电池性能表征	127
6.3 太阳能电池的效率	128
6.4 太阳能电池效率分析	130
6.5 PIN 结	133
6.6 金属-半导体接触	134
6.7 半导体-半导体异质结	137
本章小结	139
思考题	139

**第 7 章 硅太阳能电池生产工艺** 140

7.1 概述	140
7.2 硅太阳能电池产业链	142
本章小结	153
思考题	153

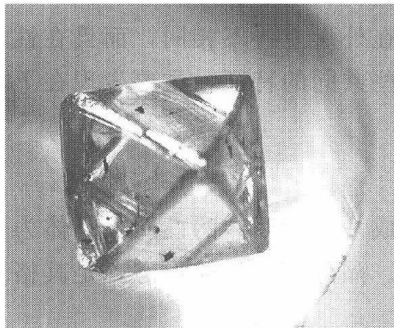
**参考文献** 154



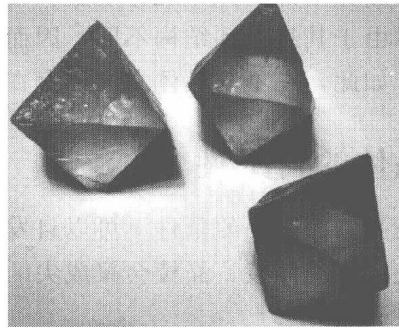
## 晶体的基本知识

### 1.1 晶体与非晶体

自然界中物质的存在状态有三种：气态、液态、固态。固体物质根据其内部结构，即微粒的排列形式可分为晶体和非晶体两类。晶体是经过结晶过程而形成的具有规则几何外形的固体，如金刚石、萤石等，如图 1-1 所示。晶体的晶粒在空间排列是长程有序的。所谓长程有序就是指固态物质的原子（或分子、离子）在空间至少在微米量级范围内按一定的方式周期性地重复排列，如图 1-2(a) 所示。可以看出，每种质点（黑点或圆圈）在整个图形中各

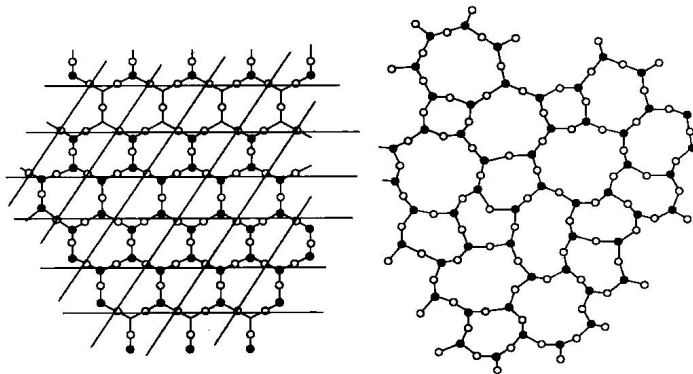


(a) 金刚石



(b) 萤石

图 1-1 金刚石和萤石的几何外形



(a) 晶体结构的规则网格

(b) 非晶体结构的无规则网

图 1-2 晶体与非晶体结构



自都呈现规律的周期性重复。把周期重复的点用直线连接起来,可获得平行四边形网格,这种图形在晶体中始终有规律地排列着。与晶体对应的,原子或分子无规则排列,无周期性、无对称性的固体叫非晶体,如玻璃、橡胶等。非晶体不具有长程有序的特点,而是短程有序或者根本就无序。所谓的短程有序,是指近邻原子的数目和种类、近邻原子之间的距离(键长)、近邻原子配置的几何方位(键角)都与晶体相近,如图 1-2(b) 所示,在晶体中一种质点(黑点)周围的另一种质点(小圆圈)的排列是一样的,这种规律叫做短程有序。

## 1.2 晶体的特性

如果将大量的原子聚集到一起构成固体,那么显然原子会有无限多种不同的排列方式。而在相应于平衡状态下的最低能量状态,则要求原子在固体中有规则地排列。若把原子看作刚性小球,按物理学定律,原子小球应整齐地排列成平面,又由各平面重叠成规则的三维形状的固体。

人们很早就注意一些具有规则几何外形的固体,如岩盐、石英等,并将其称为晶体。显然,这是不严格的,它不能反映出晶体内部结构本质。事实上,晶体在形成过程中,由于受到外界条件的限制和干扰,往往并不是所有晶体都能表现出规则外形;一些非晶体,在某些情况下也能呈现规则的多面体外形。因此,晶体和非晶体的本质区别主要并不在于外形,而在于内部结构的规律性。迄今为止,已经对 5000 多种晶体进行了详细的 X 射线研究,实验表明,组成晶体的粒子(原子、离子或分子)在空间的排列都是周期性的、有规则的,即长程有序;而非晶体内部的分布规律则是长程无序。

各种晶体由于其组分和结构不同,因而不仅在外形上各不相同,而且在性质上也有很大的差异。尽管如此,在不同晶体之间仍存在着某些共同的特征,主要表现在下面几个方面。

### 1.2.1 晶体的自限性

自限性是晶体在适当的条件下可以自发地形成几何多面体的性质。晶体为平的晶面所包围,晶面相交成直的晶棱,晶棱会聚成尖的角顶。晶体的多面体形态,是其格子构造在外形上的直接反映。

晶面的交线称为晶棱,晶棱互相平行的晶面的组合称为晶带,如图 1-3(a) 中  $a_1b_2$ 。互

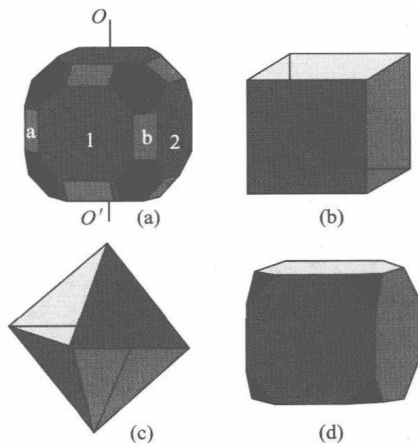


图 1-3 晶体中的晶棱和晶带



相平行的晶棱的共同方向称为该晶带的带轴，晶轴是重要的带轴，如图 (a) 中  $OO'$ 。

## 1.2.2 晶体的对称性

晶体是由原子或原子团在三维空间中规则地重复排列而成的固体。若对晶体实施某种操作，则会使晶体各原子的位置发生变化。所谓晶体的对称性，就是指晶体的某些部分，通过一定的操作（如旋转、镜面）后，和原来的晶体位置重合，换句话说也就是相同的部分可以通过一定的操作彼此重合起来，使图形恢复原来的形象，宏观性质在不同方向上有规律地重复出现，称这个操作为对称操作。对称操作所依赖的几何要素叫对称元素。

晶体的对称性可分为宏观对称性和微观对称性。前者指晶体的外形对称性，后者指晶体微观结构的对称性，晶体的对称性反映在晶体的几何外形和物理性质两个方面。实验表明，晶体的许多物理性质都与其几何外形的对称性相关，下面介绍最基本的对称操作： $n$  度旋转对称轴。

众所周知，一正方形绕中心且与其成垂直的轴旋转  $\frac{\pi}{2}$  后，能够自身重合，这种轴称为旋转轴。如果晶体绕某一旋转轴旋转  $\frac{2\pi}{n}$  后，仍能自身重合，则称其为  $n$  度旋转对称轴。由于晶体的周期性的限制，并不是  $n$  可以取任何值都可以。

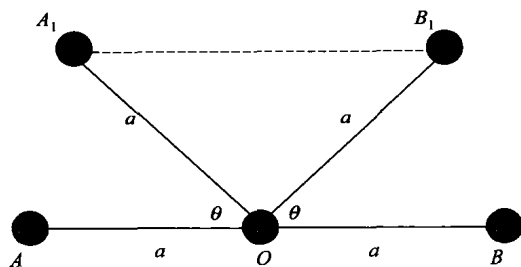


图 1-4 转换变动的示意图

如图 1-4 所示， $A$ 、 $O$ 、 $B$  是某一晶列上相邻的 3 个格点，周期为  $a$ ，如果绕过  $O$  点垂直于晶列的转轴顺时针转  $\theta$  角， $A$  转到  $A_1$ ，晶体自身重合，则  $A_1$  点必为一格点。再绕过  $O$  点的转轴逆时针转  $\theta$  角，晶体恢复到未转动时的状态，但此时  $B$  处格点转到  $B_1$  点，则  $B_1$  处必为一格点。可以知道  $AB // A_1B_1$ ，平行晶列具有相同的周期，则

$$A_1B_1 = ma = 2a |\cos\theta| \quad (1-1)$$

$$|\cos\theta| = k/2 \leq 1 \quad (1-2)$$

其中  $k$  为正整数或零。

- |             |                    |   |          |
|-------------|--------------------|---|----------|
| ① 当 $k=0$ 时 | $ \cos\theta =0$   | $\theta=\pi/2 \quad 3\pi/2$                           | $n=4$    |
| ② 当 $k=1$ 时 | $ \cos\theta =1/2$ | $\theta=\pi/3 \quad 2\pi/3 \quad 4\pi/3 \quad 5\pi/3$ | $n=3, 6$ |
| ③ 当 $k=2$ 时 | $ \cos\theta =1$   | $\theta=2\pi, \pi$                                    | $n=1, 2$ |

因为顺时（或逆时）针转动  $4\pi/3$ 、 $3\pi/2$ 、 $5\pi/3$  分别等价于逆时（或顺时）针转动  $2\pi/3$ 、 $\pi/2$ 、 $\pi/3$ ，所以晶格转动的独立转角为  $2\pi$ 、 $\pi$ 、 $2\pi/3$ 、 $\pi/2$ 、 $\pi/3$ 。

综合上述证明得：

$$\theta = \frac{2\pi}{n} \quad (n=1, 2, 3, 4, 6) \quad (1-3)$$

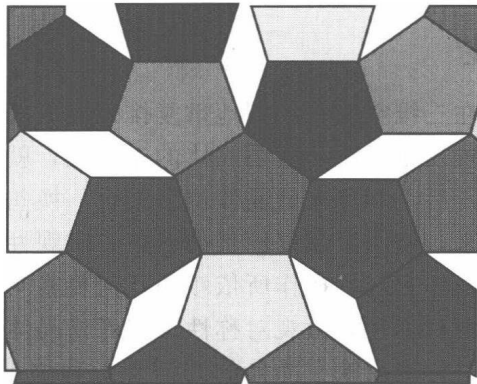


图 1-5 晶格中不可能存在五重轴示意图

也就是说不具有  $5^\circ$  或  $6^\circ$  以上的旋转对称轴，如图 1-5 所示。不难设想，如果晶体中有  $n=5$  的对称轴，则垂直于轴的平面上格点的分布至少应是五边形，但这些五边形不可能相互拼接而充满整个平面，从而不能保证晶格的周期性。

现在，已经发现一些固体具有 5 次旋转对称轴，这些具有 5 次或 6 次以上旋转对称轴但不具备周期性结构的固体，称为准晶体。

### 1.2.3 晶体固定的熔点

在一定的压力下将晶体加热，只有达到某一温度（熔点）时，晶体才开始熔化，如图 1-6(a) 所示，在晶体没有全部熔化之前，即使继续加热，温度仍保持恒定不变，这时所吸收的热能都消耗在使晶体从固态转变为液态，直至晶体完全熔化后，温度才继续上升，这说明晶体都具有固定的熔点。例如常压下冰的熔点为  $0^\circ\text{C}$ ，石英的熔点是  $1470^\circ\text{C}$ ，单晶硅的熔点是  $1420^\circ\text{C}$ 。非晶体则不同，如图 1-6(b) 所示，加热时先软化成黏度很大的物质，随着温度的升高黏度不断减小，最后成为流动性的熔体，从开始软化到完全熔化的过程中，温度是不断上升的，没有固定的熔点，只能说有一段软化的温度范围，例如松香在  $50\sim 70^\circ\text{C}$  之间软化， $70^\circ\text{C}$  以上才基本上成为熔体。

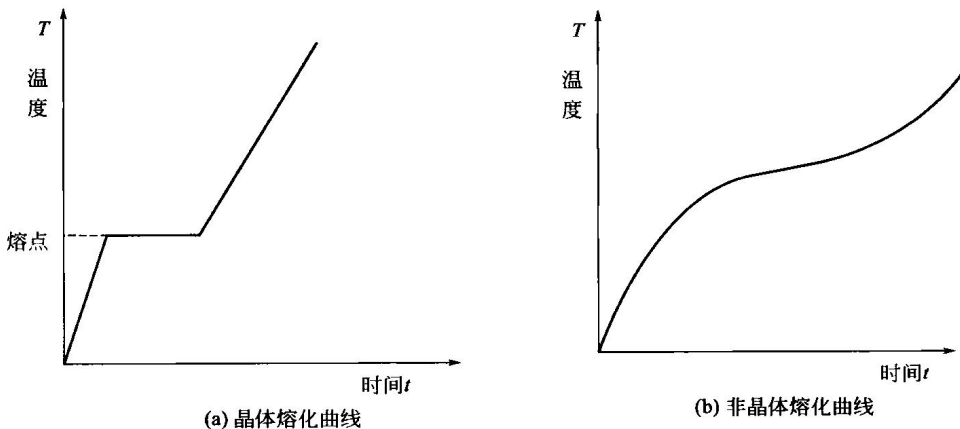


图 1-6 晶体与非晶体的熔化曲线



## 1.2.4 晶体的均匀性

由于同一个晶体的各个不同部分，质点的分布是一样的，所以晶体的各个部分的物理性质与化学性质也是相同的，这就是晶体的均一性。这是由晶体的格子周期性构造所决定的。

## 1.2.5 晶体的各向异性

一块晶体的某些性质，如光学性质、力学性质、导热性、导电性、溶解性等，从晶体的不同方向去测定时，常常是不同的。例如石墨晶体内，平行于石墨层方向比垂直于石墨层方向的热导率要大 4~6 倍，电导率要大万倍。晶体的这种性质称为各向异性。而非晶体是各向同性的。

晶体和非晶性质上的差异，反映了两者内部结构的差别。应用 X 射线研究表明，晶体内部微粒（原子、离子或分子）的排列是有序的、有规律的，这样有次序的、周期性的排列规律贯穿于整个晶体内部，而且在不同方向上的排列方式往往不同，因而造成了晶体的各向异性，如图 1-7 所示。

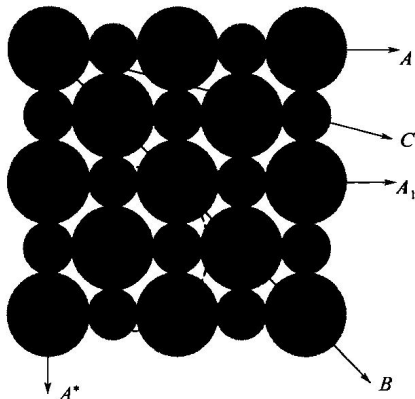


图 1-7 NaCl 晶体结构 (100) 面示意图

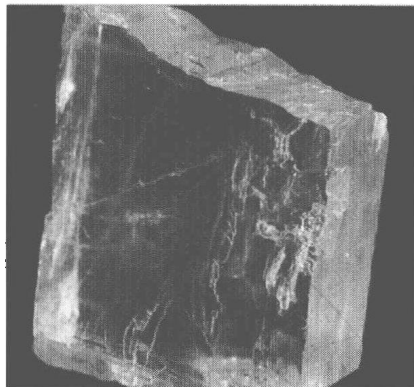


图 1-8 食盐的解理面

## 1.2.6 晶体的解理性

当晶体受到敲打、剪切、撞击等外界作用时，有沿某一个或几个具有确定方位的晶面劈裂开来的性质。如固体云母（一种硅酸盐矿物）很容易沿自然层状结构平行的方向劈为薄片，晶体的这一性质称为解理性，这些劈裂面则称为解理面。自然界的晶体显露于外表的往往就是一些解理面，如图 1-8 所示。

## 1.2.7 最小内能和稳定性

从气态、液态或非晶态过渡到晶态时都要放热，反之，从晶态转变为非晶态、液态或气态时都要吸热。表明在相同的热力学条件下，与同种化学成分的气体、液体或非晶体相比，晶体的内能最小。即在相同的热力学条件下，以具有相同化学成分的晶体与非晶体相比，晶体是稳定的，内能是最小的，非晶体是不稳定的，后者有自发转变为晶体的趋势，因而结晶状态是一个相对稳定的状态。





## 1.2.8 晶体能使 X 射线产生衍射

晶体的宏观特性是由晶体内部结构的周期性决定的，即晶体的宏观特性是微观特性的反映。20 世纪初，结晶学上的重大进展是 X 射线衍射的发现。劳厄 (Laue) 首先提出，晶体可以作为 X 射线的衍射光栅。1912 年，德里希和尼平用实验证实了他的想法。此后，布拉格 (Bragg) 父子及其他人，在实验和理论方面作了许多重要的改进工作，建立了 X 射线结构分析的许多方法，近代电子衍射和中子衍射是 X 射线衍射方法的发展。晶体结构的周期和 X 射线的波长差不多，作为三维光栅，使 X 射线产生衍射现象，X 射线衍射是了解晶体结构的重要实验方法。电子衍射和中子衍射对于 X 射线则是有力的补充。对于电子衍射，电磁波不仅受到晶格中的电子散射，还受到原子核的散射，所以散射很强。由于透射力很弱，它只能透入晶体内一个较短距离，适于研究晶体表面结构。而中子具有磁矩，它与固体中磁性电子可发生相互作用，故中子衍射适于研究磁性材料晶体结构。利用量子隧道效应进行晶体结构分析的扫描隧道显微镜，是最近 20 年发展起来的另一种新的晶体结构分析手段。

## 1.2.9 晶面角守恒

由于外界条件和偶然情况不同，同一类型的晶体，其外形不尽相同。图 1-9 给出理想石英晶体的外形，图 1-10 是一种人造的石英晶体，表明由于外界条件的差异，晶体中某组晶面可以相对地变小，甚至消失。所以，晶体中晶面的大小和形状并不是表征晶体类型的固有特征。

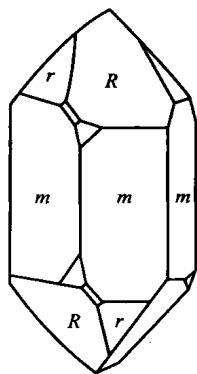


图 1-9 理想石英晶体

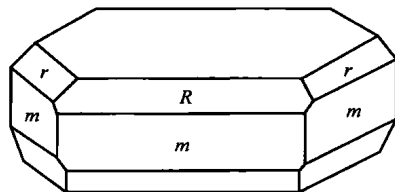


图 1-10 人造石英

那么，由晶体内在结构所决定的晶体外形的固有特征是什么呢？1669 年，一个叫做斯丹诺 (Nicolas Steno) 的意大利人对水晶进行了仔细的研究后发现，尽管不同的石英晶体，其晶面的大小、形状、个数都可能会有所不同，但是相应的晶面之间的夹角都是固定不变的，这就是斯丹诺定律：在同一温度下，同一种物质所形成的晶体，其相同晶面的夹角是一个常数。

图 1-11 为石英晶体的外形， $a$ 、 $b$  间夹角总是  $141^{\circ}47'$ ， $a$ 、 $c$  间夹角总是  $113^{\circ}08'$ ， $b$ 、 $c$  间夹角总是  $120^{\circ}00'$ 。

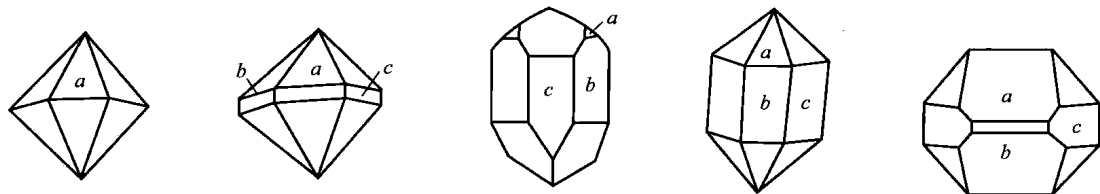


图 1-11 石英晶体的若干外形

## 1.3 常见晶体的类型

晶体根据不同的结构和功能有很多种分类，晶体类型不同，表现出来的性能也大不相同。

### 1.3.1 晶体的分类

晶体按其结构粒子和作用力的不同可分为离子晶体、原子晶体、分子晶体、金属晶体和氢键晶体，根据功能不同可分为导体、半导体、绝缘体、磁介质、电介质和超导体。

物质存在的形式多种多样，如固体、液体、气体、等离子体等。从导电性能的角度，通常把导电、导热性差或不好的材料，如金刚石、人工晶体、琥珀、陶瓷等，称为绝缘体。而把导电、导热都比较好的金属，如金、银、铜、铁、锡、铝等称为导体。可以简单地把导电能力介于导体和绝缘体之间的材料称为半导体。半导体材料是一类具有半导体性能、可用来制作半导体器件和集成电路的电子材料，其电阻率在  $10^{-6} \sim 10^{10} \Omega \cdot \text{cm}$  范围内。半导体材料的电学性质对光、热、电、磁等外界因素的变化十分敏感，在半导体材料中掺入少量杂质可以控制这类材料的电导率。正是利用半导体材料的这些性质，才制造出功能多样的半导体器件。半导体材料是半导体工业的基础，它的发展对半导体技术的发展有极大的影响。与导体和绝缘体相比，半导体材料的发现是最晚的，直到 20 世纪 30 年代，当材料的提纯技术改进以后，半导体的存在才真正被学术界认可。

从晶体结构的角度，晶体还可以分为单晶和多晶。所谓单晶，就是整个晶体中质点在空间的排列为长程有序。单晶整个晶格是连续的，具有重要的工业应用价值。一个理想的晶体就是在三维空间里由全同结构单元无间隙地、周期性地、重复地构建而成。这种无限重复的结构遍及整个晶体。单晶体是由一个晶核（微小的晶体）各向均匀生长而成的，其晶体内部的粒子基本上按照某种规律整齐排列。单晶硅就是单晶体。单晶体要在特定的条件下才能形成，而在自然界较少见（如宝石、金刚石等），但可人工制取。通常所见的晶体是由很多单晶颗粒杂乱地凝聚而成的，尽管每颗小单晶的结构是相同的，是各向异性的，但由于单晶之间排列杂乱，各向异性的特征消失，使整个晶体一般不表现出各向异性，这种晶体称为多晶体。多晶体没有贯穿整个晶体的结构。构成多晶，成千上万的单晶晶粒的尺寸大多在厘米级至微米级范围内变化。

单晶体与单晶体之间存在着结构的过渡，即存在着界面。而界面是一种缺陷，所以说多晶体中包含着许多缺陷。缺陷的存在影响着晶体的物理性质。由同种成分组成的单晶体和多晶体具有不同的性能。因此内在结构完全规则、无缺陷时被称之为完整晶体。固体物理就是在研究了完整晶体（单晶体）的基础上，主要从研究近乎完整晶体中微量缺陷的作用而展开



的。目前，固体物理已成为固体材料和固体器件的基础学科，是固体新材料和新器件的生长点。

### 1.3.2 常见半导体材料

常用的半导体材料分为元素半导体和化合物半导体。元素半导体是由单一元素制成的半导体材料，主要有硅、锗、硒等。20世纪50年代，锗在半导体中占主导地位，但锗半导体器件的耐高温和抗辐射性能较差，到60年代后期逐渐被硅材料取代。用硅制造的半导体器件，耐高温和抗辐射性能较好，特别适宜制作大功率器件。因此，硅已成为应用最多的一种半导体材料，目前的集成电路大多数是用硅材料制造的。化合物半导体由两种或两种以上的元素化合而成。它的种类很多，如Ⅲ-V族（如砷化镓、磷化镓、磷化铟等）、Ⅱ-VI族（如硫化镉、硒化镉、碲化锌、硫化锌等）、Ⅳ-VI族（如硫化铅、硒化铅等）、Ⅳ-Ⅳ族（如碳化硅）化合物、氧化物（锰、铬、铁、铜的氧化物）。其中砷化镓是制造微波器件和集成电路的重要材料。碳化硅由于其抗辐射能力强、耐高温和化学稳定性好，在航天技术领域有着广泛的应用。

半导体按照其制造技术可以分为集成电路器件、分立器件、光电半导体、逻辑IC、模拟IC、存储器等几大类；按照其所处理的信号，可以分成模拟、数字、模拟数字混合等。

### 1.3.3 半导体的掺杂

本征半导体是指不含杂质且无晶格缺陷的半导体。在极低温度下，半导体的价带是满带，受到热激发后，价带中的部分电子会越过禁带进入能量较高的空带，空带中存在电子后成为导带，价带中缺少一个电子后形成一个带正电的空位，称为空穴。导带中的电子和价带中的空穴合称电子-空穴对。电子和空穴统称为载流子，它们在外电场作用下产生定向运动而形成宏观电流，分别称为电子导电和空穴导电。这种由于电子-空穴对的产生而形成的混合型导电称为本征导电。导带中的电子会落入空穴，电子-空穴对消失，称为复合。复合时释放出的能量变成电磁辐射（发光）或晶格的热振动能量（发热）。在一定温度下，电子-空穴对的产生和复合同时存在并达到动态平衡，此时半导体具有一定的载流子密度，从而具有一定的电阻率。温度升高时，将产生更多的电子-空穴对，载流子密度增加，电阻率减小。无晶格缺陷的纯净半导体的电阻率较大，实际应用不多。

在高纯半导体材料中掺入适当杂质后，由于杂质原子提供导电载流子，使材料的电阻率大为降低。这种掺杂半导体常称为杂质半导体。在一种具有4个价电子的半导体材料中，当把具有3个价电子的元素作为杂质掺入其中时，就形成了P型半导体；如果在一种具有4个价电子的半导体材料中，把具有5个价电子的元素作为杂质掺入其中时，就形成了N型半导体。N型半导体靠导带电子导电，P型半导体靠价带空穴导电。采用不同的手段在P型硅的一面掺入五价的元素磷，形成N型层，就构成了硅太阳能电池的核心部件PN结。因电子（或空穴）浓度差而产生扩散，在接触处形成位垒，因而这类接触具有单向导电性。利用PN结的单向导电性，可以制成具有不同功能的半导体器件，如二极管、三极管、晶闸管等。此外，半导体材料的导电性对外界条件（如热、光、电、磁等因素）的变化非常敏感，据此可以制造各种敏感元件，用于信息转换。半导体材料的特性参数有禁带宽度、电阻率、载流子迁移率、非平衡载流子寿命和位错密度等。禁带宽度由半导体的电子态、原子组态决



定，反映组成这种材料的原子中价电子从束缚状态激发到自由状态所需的能量。电阻率、载流子迁移率反映材料的导电能力。非平衡载流子寿命反映半导体材料在外界作用（如光或电场）下内部载流子由非平衡状态向平衡状态过渡的弛豫特性。位错是晶体中最常见的一类缺陷。位错密度用来衡量半导体材料晶格完整性的程度，对于非晶态半导体材料，则没有这一参数。半导体材料的特性参数不仅能反映半导体材料与其他非半导体材料之间的差别，更重要的是能反映各种半导体材料之间甚至同一种材料在不同情况下其特性的量值差别。

## 1.4 空间点阵和晶胞

### 1.4.1 晶体的微观描述

#### (1) 晶体结构

晶体是由大量相同或不同的原子构成的，这些粒子按一定的规则排列方式组成晶体。晶体中原子排列的具体形式称为晶体结构，如图 1-12 所示。

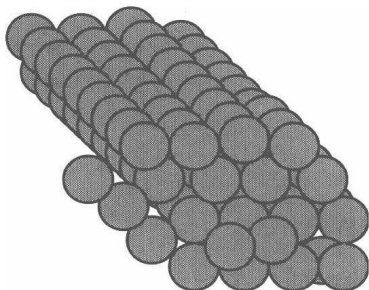


图 1-12 微粒按一定的规律排列组成晶体

**注意：**不同晶体原子规则排列的具体形式可能是不同的（如 Fe、Co），也可能是相同的（如 Fe、Na）；而同种晶体原子规则排列的具体形式也具有上述情况，如 Fe、C 的同素异构转变。

#### (2) 阵点、空间点阵、晶格

为了便于了解晶体的结构，做如下假设：晶体中的原子被看作是不动的刚性小球，而且晶体中不含各种缺陷（理想晶体）；同时把这些刚性小球抽象成一些几何点，上述这些抽象的几何点叫做阵点或格点，由这些阵点组成的空间排列叫做空间点阵，如图 1-13 所示。

对于格点的选取，其位置既可以是原子或分子的中心，也可以是相同原子群的中心，还可以代表数种原子组成晶体中的结构单元的重心，并且格点的周围环境必须相同，如图 1-14 所示。

为了表达空间点阵的几何规律，可以用许多相互平行的直线将阵点连接起来，且格点包括无遗，从而构成一个三维的几何格架，这种格架叫做空间格子或晶格或布喇非格子，如图 1-15 所示。

**应该注意：**在给定的空间点阵中，阵点的位置是一定的，但通过阵点连成的晶格则因连接方法不同而有不同形式。即阵点是空间点阵的基本要素，但晶格却可以人为地选定，如图 1-16 所示。

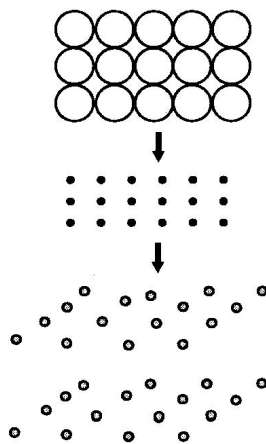


图 1-13 阵点和空间点阵