



航天电源技术系列

物理电源技术

WULI DIANYUAN JISHU



上海空间电源研究所 编著



科学出版社

航天电源技术系列

物理电源技术

上海空间电源研究所 编著



科学出版社

北京

内 容 简 介

本书密切结合当前航天器电源分系统中物理电源研究、设计、制造和应用,对电子电源的理论、技术、制造和测试进行较为详尽的论述。

全书共 10 章,内容包括:概述、半导体物理基本知识、太阳电池基本原理、硅太阳电池、砷化镓太阳电池、太阳电池板制造及装配、产品测试和质量检验、太阳电池阵设计、薄膜太阳电池、其他物理电源。

本书可供从事和关心航天器总体和电源分系统技术领域的设计、制造、测试及应用的专业技术人员和管理人员使用,也可作为高等院校相关专业本科高年级学生和研究生选修教材或参考书。

图书在版编目(CIP)数据

物理电源技术/上海空间电源研究所编著.--北京:科学出版社,2015.2

(航天电源技术系列)

ISBN 978-7-03-043232-2

I. ①物… II. ①上… III. ①物理电源 IV. ①TM91

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 022545 号

责任编辑:王艳丽 邢宝钦

责任印制:谭宏宇 / 封面设计:殷 靓

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

上海叶大印务发展有限公司印刷

上海蓝鹰文化传播有限公司排版制作

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015 年 2 月第 一 版 开本:787×1092 1/16

2015 年 2 月第一次印刷 印张:20 1/4

字数:454 000

定价:100.00 元

前 言

上海空间电源研究所是我国抓总研制空间电源分系统的专业研究所,主要承担航天器、航空器、导弹、火箭及其他特殊设备用电源系统的研究、设计、制造和试验任务。物理电源在电源分系统中承担着太阳能发电的作用,是电源分系统的重要组成部分。本书内容全面,强调设计与应用相结合,实用性强,是从事和关心航天器总体和电源分系统技术领域研究、设计、制造、测试、应用和管理的专业技术人员、大专院校师生和管理干部的一本很好的参考书。

全书共分为 10 章,第 1 章概述,主要介绍了太阳电池的基本性能和太阳辐射。第 2 章半导体物理基本知识,主要介绍了半导体物理领域的一些基本概念。第 3 章太阳电池基本原理,介绍了太阳电池光电转换的基本原理。第 4 章硅太阳电池,介绍了硅太阳电池的硅材料制备和电极材料制备及太阳电池制备的各项工艺流程。第 5 章砷化镓太阳电池,介绍了砷化镓太阳电池的概述和制备工艺流程。第 6 章太阳电池板制造及装配,介绍了太阳电池板的结构和性能,以及空间用和地面用太阳电池的制造。第 7 章产品测试和质量检验,介绍了太阳电池和太阳电池阵帆板的各项参数的测量、质量检验及分析。第 8 章太阳电池阵设计,举例说明了太阳电池阵设计的方式、方法。第 9 章薄膜太阳电池,介绍了非晶硅、铜铟镓硒和碲化镉等三类薄膜太阳电池。第 10 章其他物理电源,介绍了新型太阳电池、空间核电源和热电转换器件等。

本书由上海空间电源研究所组织编写,其中第 1 章由李国欣编写,第 2 章由孙利杰编写,第 3 章由陈萌炯编写,第 4 章由雷刚编写,第 5 章由姜德鹏编写,第 6 章由王训春编写,第 7 章由张梦炎编写,第 8 章由刘智编写,第 9 章由徐传明编写,第 10 章由陈雪编写,以上作者的单位均为上海空间电源研究所。

在本书初稿的编写过程中,空间电源技术实验室整理并提供了国内外物理电源技术最新发展状况以及后续发展方向,本书初稿完成后,李国欣对全书的内容进行了审稿,并提供了宝贵的意见和建议,上海空间电源研究所科技委专门邀请了专家对本书进行认真的评审,在此一并表示感谢。本书凝聚了上海空间电源研究所的各级领导的关心和支持,各领域同事和朋友的帮助和鼓励以及各章节作者的心血和智慧。

限于作者水平有限,本书难免会存在一些不足之处,恳请广大读者批评指正。

上海空间电源研究所

2014 年 9 月

目 录

前言

第 1 章 概述	1
1.1 引言	1
1.2 太阳能电池的基本性能	2
1.3 太阳辐射	6
第 2 章 半导体物理基本知识	9
2.1 半导体的晶格结构和特性	9
2.2 能级和能带图	11
2.3 本征半导体	16
2.4 掺杂半导体和费米能级	22
2.5 载流子的输运	32
2.6 载流子的产生、复合与寿命	34
2.7 pn 结及其能带图	40
第 3 章 太阳能电池基本原理	45
3.1 光电转换的物理过程	45
3.2 太阳能电池的 $I-V$ 特性	45
3.3 太阳能电池量子效率谱	52
3.4 太阳能电池光电转换效率	55
3.5 非理想影响因素	61
3.6 太阳能电池器件模拟	67
第 4 章 硅太阳能电池	72
4.1 硅太阳能电池简述	72
4.2 硅材料制备	77
4.3 硅片表面处理	84
4.4 扩散制结	87
4.5 扩散的掩蔽	99
4.6 表面钝化	103
4.7 电极制备	105
4.8 光刻制备图形	118
4.9 减反射膜制备	120
4.10 空间用太阳能电池制造	124
4.11 地面用太阳能电池制造	125

第 5 章 砷化镓太阳电池	129
5.1 砷化镓太阳电池概述	129
5.2 砷化镓太阳电池制备	153
第 6 章 太阳电池板制造及装配	176
6.1 引言	176
6.2 太阳电池板的结构和性能	177
6.3 空间用太阳电池板制造及装配	197
6.4 地面用太阳电池组件制造	211
第 7 章 产品测试和质量检验	215
7.1 太阳电池电性能测量	215
7.2 太阳电池其他参数的测量	223
7.3 太阳电池的质量检验及分析	226
7.4 太阳电池阵帆板电性能测量	227
7.5 太阳电池阵帆板的质量检验及分析	229
7.6 太阳电池标定	230
第 8 章 太阳电池阵设计	239
8.1 设计依据	239
8.2 叠层太阳电池的性能设计	240
8.3 太阳电池电路串并联设计	241
8.4 太阳电池板尺寸质量预计	246
8.5 设计结果与指标符合性	247
8.6 举例说明	247
8.7 地面太阳光伏电站设计	250
第 9 章 薄膜太阳电池	258
9.1 非晶硅薄膜太阳电池	260
9.2 铜铟镓硒薄膜太阳电池	275
9.3 碲化镉薄膜太阳电池	287
第 10 章 其他物理电源	294
10.1 新型太阳电池	294
10.2 空间核电源	306
10.3 热电转换器件	309
参考文献	315

第1章 概述

1.1 引言

顾名思义,太阳电池是把太阳能直接转换成电能的半导体器件。自从1954年美国Bell电话实验室制造出世界上第一个实用的硅太阳电池以来,经过半个世纪的努力,太阳电池的研究、开发和产业化已取得重大进步,太阳电池在电能源和光电器件两个领域的应用取得了极大的成功。如今,世界上90%以上的人造卫星、宇宙飞船、载人空间站和深空探测器等航天飞行器均采用太阳电池作为主能源,其光电转换效率越来越高,已从20世纪60年代的10%发展到如今的30%以上。同时,太阳电池已成为地面无电、少电地区及某些特殊领域的重要电源。随着制造成本的不断降低,以硅为主的太阳电池发电逐步取代煤、石油、天然气等常规能源发电是一个必然的发展趋势。

太阳能是一种取之不尽、用之不竭的洁净的巨大新能源。利用太阳能,既不会出现大气污染,也不会影响生态平衡。太阳电池发电的优点是光电转换效率高,质量轻,寿命长,无污染,使用维护简便,缺点是成本较高。制造太阳电池的材料除硅外,还有砷化镓、碲化镉等。目前,有实用价值的主要是单晶硅太阳电池,其次是多晶硅太阳电池(空间应用仅为前者,地面应用以后者为主)。近几年,Ⅲ-V族化合物太阳电池发展很快。锗衬底的三结砷化镓太阳电池($\text{GaInP}_2/\text{GaAs}/\text{Ge}$)一下超越砷化镓单结电池和双结电池进入空间实用阶段。目前,空间用的单晶硅太阳电池和三结砷化镓太阳电池,均已建成生产线正常批产;地面用的单晶硅和多晶硅太阳电池均已大规模批量生产,其年产量和规模达到世界第一。

我国太阳电池的研究工作是从1958年开始的。1971年3月3日,在我国发射第2颗人造地球卫星——实践一号科学实验卫星上首次成功地实现了硅太阳电池的空间应用,寿命8年。1973年在天津港的海面航标灯上首次实现太阳电池的地面应用。随后,太阳电池的空间应用在地面航标灯上不断发扬光大;太阳电池的地面应用也逐渐深入。例如,硅太阳电池已成功地应用于沿海及内河的航标灯、边防哨所的照明灯、无人气象站、铁路讯号灯、地质勘探仪、地震观测站、石油管道阴极保护站、农用诱虫黑光灯、割胶灯、电牧栏、医用手术头灯、电钟、手表、收音机、电视差转机等方面的电源,已为少煤缺电的山区、农村、海岛的普及科学知识,促进电化教育,以及发展工业、农业、医疗、交通运输、航海等事业做出了重要贡献。1980~1990年,我国引进国外硅太阳电池关键设备和成套生产线及技术,先后建立地面单晶硅光伏生产企业,如宁波太阳电池厂、开封太阳电池厂、云南半导体厂、秦皇岛华美太阳电池厂等。进入21世纪后,随着我国《可再生能源法》的颁布和实施,我国太阳电池光伏产业的发展进入了一个新的高潮。

1.2 太阳能电池的基本性能

1.2.1 太阳能电池的结构组成

由于制造太阳能电池的基本材料不同,工艺方法不同,所以太阳能电池的结构也是多种多样的。硅太阳能电池结构示意图如图 1.1 所示。这是一个 p 型硅材料制成的 n^+/p 结构的太阳能电池。由于 p 型硅有更好的抗辐照性能,空间用硅太阳能电池通常用 p 型单晶硅做基体,在上面热扩散磷制成 pn 结,背面蒸镀金属电极,正面蒸镀金属栅线电极和减反射膜。基体(p 型)厚度约 0.2 mm,扩散层(n 型)厚度为 0.15~0.35 μm 。扩散层上有与它形成欧姆接触的上电极,由粗的主栅线和细栅线连接而成;基体下面有与之形成欧姆接触的下电极。上下电极都由金属材料(如 Ag-Pd-Ti 等)组成,其作用是引出电池产生的电能。处在电池光照面的减反射膜,其作用是减少光的反射,使电池接受更多的太阳光能量,其典型尺寸为 20 mm×40 mm、25.3 mm×50.9 mm、40 mm×60 mm、40 mm×80 mm、80 mm×80 mm 等。

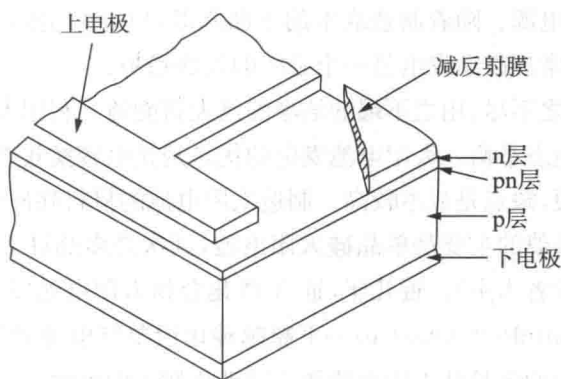


图 1.1 硅太阳能电池结构示意图

反之,地面用的太阳能电池,因成本较低,大多选用 n 型硅材料做基体,从而制成 p^+/n 结构的太阳能电池。二者结构相仿,只不过是基体和扩散层相互置换,热扩散制 pn 结的方法为硼扩散。其典型尺寸为 125 mm×125 mm、156 mm×156 mm 等。

1.2.2 太阳能电池发电基本原理

图 1.2 是太阳能电池能带的结构示意图。由于电子和空穴的扩散,在基体和扩散层的交界区域便会形成 pn 结,并在结的两边形成内建电场,又称为势垒电场。当太阳光照射电池表面时,半导体内的原子受到其能量大于 1.1 eV 的光子的激发,获得光能而释放电子,形成电子-空穴对,并在势垒电场作用下,电子被驱向 n 型区,空穴被驱向 p 型区,从而使 n 型区有过剩的电子(带负电),p 型区有过剩的空穴(带正电)。这就使 n 型区和 p 型区之间的薄层产生了电动势,即光生伏打电动势。当接通外电路时便有电能输出。只要太阳光源源不断地照射在电池表面上,外电路上便有电能源源不断地输出。这就是太阳能电池发电的基本原理。

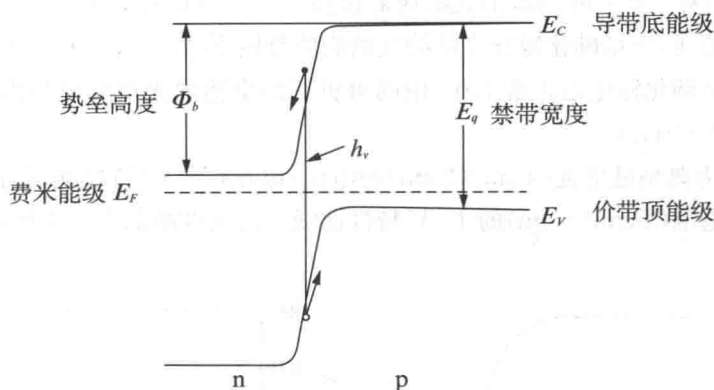


图 1.2 太阳能电池能带的结构示意图

1.2.3 太阳能电池性能参数

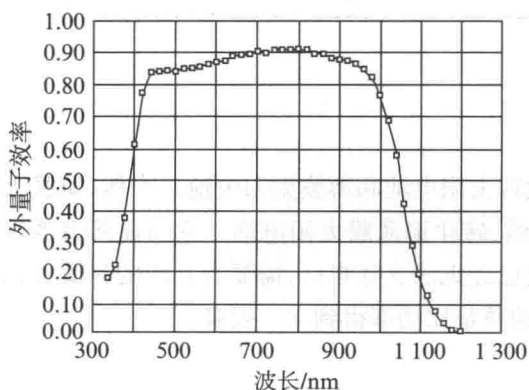
硅太阳能电池的主要技术参数如下。

光谱响应范围	0.3~1.1 μm
峰值波长范围	0.80~0.95 μm
截止波长	1.1 μm
响应时间	$10^{-3}\sim 10^{-4}$ s
使用温度	-65~125 $^{\circ}\text{C}$

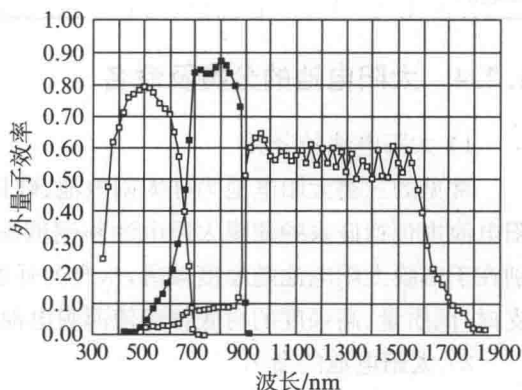
三结砷化镓太阳能电池的主要技术参数如下。

光谱响应范围	0.3~1.8 μm
截止波长	1.8 μm
响应时间	$10^{-6}\sim 10^{-9}$ s
使用温度	-150~200 $^{\circ}\text{C}$

图 1.3(a) 为典型硅电池的光谱响应曲线，由图中可以看出硅电池的响应光谱从



(a) 典型硅电池的光谱响应曲线



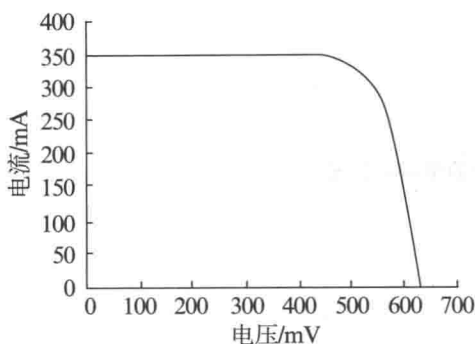
(b) 典型三结砷化镓电池的各个结光谱响应曲线

图 1.3 太阳能电池的典型光谱响应曲线

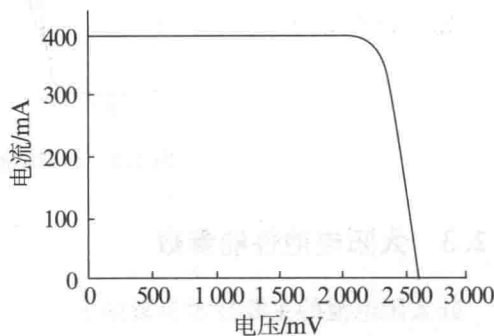


300~1 180 nm,对 700~940 nm 的光响应最强烈。图 1.3(b)是典型三结砷化镓电池的各个结光谱响应曲线,三结砷化镓各个结的光谱响应范围不同,所以只有 3 个结都在响应光谱内才能使三结砷化镓电池正常工作,由图可见三结电池的光谱响应范围要比硅电池大很多,从 300~1 850 nm。

图 1.4(a)为典型硅电池(4 cm×2 cm)的电流-电压($I-V$)特性曲线,图 1.4(b)为典型三结砷化镓电池(4 cm×6 cm)的 $I-V$ 特性曲线。其电性能如表 1.1 所示。



(a) 典型硅电池(4 cm×2 cm)的 $I-V$ 特性曲线



(b) 典型三结砷化镓电池(4 cm×6 cm)的 $I-V$ 特性曲线

图 1.4 太阳电池的 $I-V$ 特性曲线

表 1.1 典型太阳电池的电性能参数(AMO)

电池种类	电池厚度/ μm	电池单体面积/ cm^2	电池质量/ $(\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$	V_{oc} / mV	J_{sc} / $(\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2})$	V_{mp} / mV	J_{mp} / $(\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2})$	P_{mp} / $(\text{mW} \cdot \text{cm}^{-2})$	FF	典型效率/%	效率范围/%	吸收系数 α	发射系数 ϵ	电压系数/ $(\text{mV}/^\circ\text{C})$	电流系数/ $(\mu\text{A} \cdot \text{cm}^{-2}/^\circ\text{C})$
硅太阳电池	200	0~8×8	55	605	42.5	495	40.5	20.0	0.780	14.8	14.0~15.5	0.76	0.84	-2.3	22
三结砷化镓太阳电池	175	0~4×8	100	2 575	16.9	2 275	15.95	36.3	0.83	26.8	26.0~28.0	0.90	0.84	-6.8	9

1.2.4 太阳电池的分类及命名

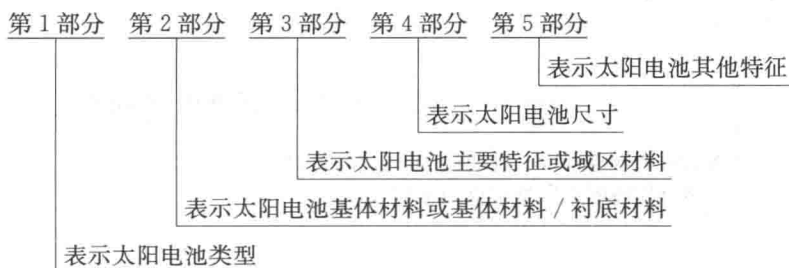
1) 太阳电池的分类

常见的三类太阳电池为硅太阳电池、砷化镓太阳电池和薄膜太阳电池。当然,薄膜太阳电池也包括硅系的薄膜太阳电池和铜铟镓硒、碲化镉薄膜太阳电池。它与前两者的区别在于薄膜太阳电池随厚度减薄,本身的强度已经无法支撑自己,需要其他的衬底加以支撑,低质量、高强度的衬底材料使薄膜电池的质量比功率得到大大提高。

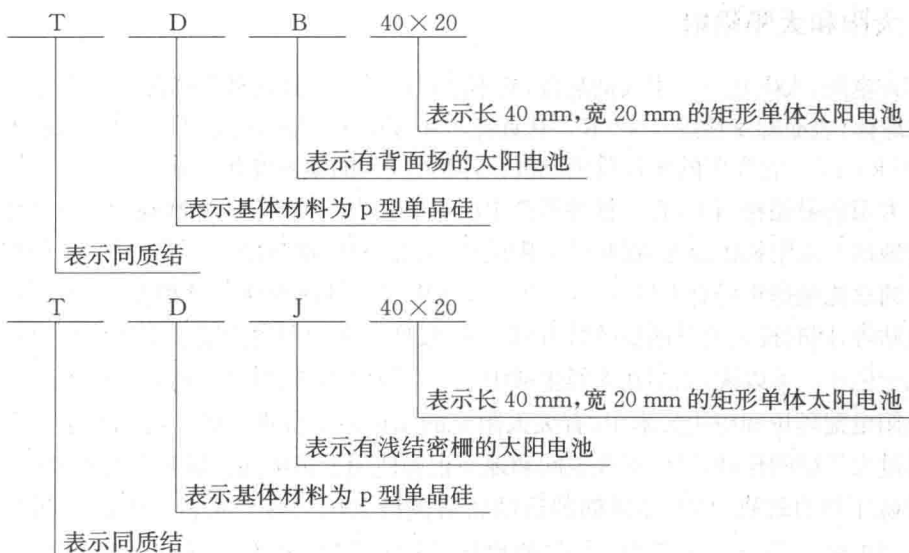
2) 太阳电池的命名

按 GB/T 2296—2001 规定,太阳电池的命名方法如下。

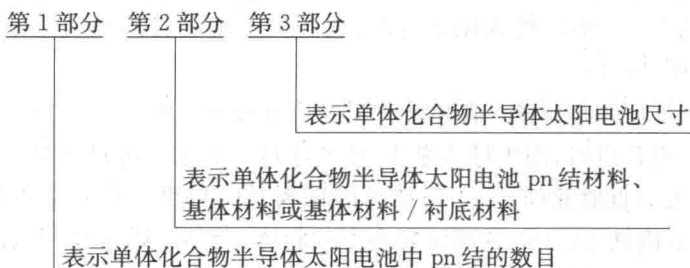
(1) 单元素半导体太阳电池型号命名由 5 部分组成,如下所示:



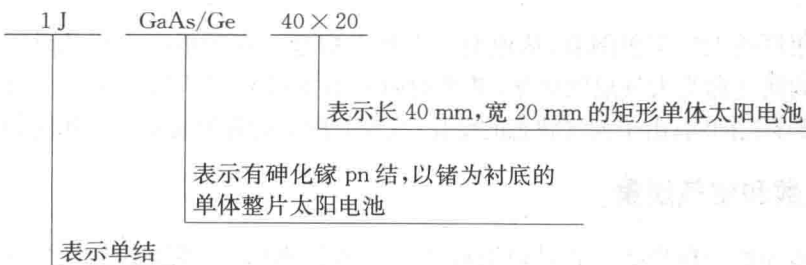
如空间常用的 TDB 40×20、TDJ 40×20 电池的意思为:



(2) 单体化合物半导体太阳能电池型号命名由 3 部分组成, 如下所示:



如空间常用的 1J GaAs/Ge 40×20、3J GaInP₂/GaAs/Ge 60×40 电池的意思为:





3 J	GaInP ₂ /GaAs/Ge	60 × 40
表示三结		表示长 60 mm, 宽 40 mm 的矩形单体太阳电池
表示有镓铟磷 pn 结, 砷化镓 pn 结, 锗 pn 结, 以锗为衬底的单体整片太阳电池		

1.3 太阳辐射

1.3.1 太阳和太阳辐射

在宇宙空间,太阳是一个很大的热源,它不断以电磁波形式向外发送能量。它是一个炽热的气态球体,表面温度接近 6 000 K。其直径为 1.39×10^6 km,质量为 2×10^{30} kg,平均密度为 $1\,400 \text{ kg/m}^3$ 。它发射的波长范围也很宽,但 99.8% 的辐射能集中在 $0.22 \sim 20 \mu\text{m}$ 波长范围内。太阳辐射能相当大,它一秒钟所产生的热能相当于 115 亿 t 标准煤燃料所产生的能量。尽管地球和太阳相距遥远,接收的太阳能还不到总辐射能量的二十亿分之一,但到达地球表面上的总能量每年仍有大约 5.44×10^{24} J,这相当于目前地球上各种能源(水力、火力、原子能电站等)同时提供的总能量的数万倍。并且,现在太阳中储能能量至少还可以供它继续发射几十亿年。可以说,太阳在人类生活中是一个取之不尽、用之不竭的巨大能源。

在太阳电池理论和应用技术中,有关太阳光的知识是十分重要的。特别是了解太阳辐射以及通过大气层的传播特性,对在空间和地面正确使用太阳电池无疑是十分必要的。

地球除了绕自转轴自转,还以椭圆形的轨道围绕太阳公转。每转一圈的时间为地球上的 1 年,约 365.25 天。1 年内,太阳和地球之间的距离是不一样的。它用天文单位(AU)来衡量, $1 \text{ AU} = 1.495\,978\,930 \times 10^8 \text{ km}$,这是太阳与地球之间的平均距离。每年 1 月 3 日,地球离太阳最近,近日点约 $1.471 \times 10^8 \text{ km}$,7 月 4 日地球离太阳最远,远日点约 $1.521 \times 10^8 \text{ km}$,二者相差约 3%。地球绕太阳运行时,它的自转轴的方向与轨道面的法线方向夹角始终保持不变(即 23.45°)。

地球得到的太阳辐射的强弱与地球离太阳的距离的平方成反比。因此,在近日点时,地球得到的总热量稍大些。近日点时,南半球为夏季,而北半球为冬季。远日点时正巧相反。在北半球夏至的时候,太阳直射北纬 23.45° ,该纬度称为北回归线。北半球冬至时,南半球为夏至,这时太阳直射南纬 23.45° ,该纬度称为南回归线。春分、秋分时,太阳直射赤道。地球绕太阳公转时,还绕地轴由西向东自转,自转一圈的时间为 24 h,即地球每自转 15° 的时间为 1 h。由于地球自转,地面上某一个固定点每时每刻收到的太阳能量是不一样的。

地球被一层很厚的大气层包围着,从地面一直到无穷远。底为单位面积的垂直圆柱体内所含的气体的质量称为大气层的质量(其平均质量为 $1.034 \times 10^4 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2}$)。太阳辐射通过大气层时要受到削弱;由于大气状态的变化,其受到削弱的程度也是大不相同的。

1.3.2 太阳常数和空气质量

辐射是能量传递的一种形式。它是以电磁波的方式传递的,不需要任何物质作为媒

介。相反,若在传递空间遇到某种物质,则传递的能量就会由于被吸收、散射和反射而削弱。辐射的传递速度等于光速。

辐射的波长范围很广,从波长 $10^{-10} \mu\text{m}$ 的宇宙线到波长达几千米的无线电波都是辐射的波长范围(图 1.5)。

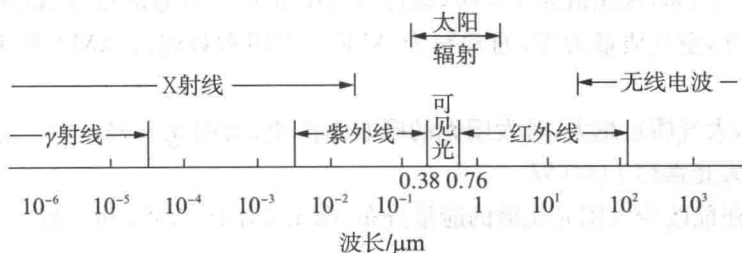


图 1.5 各种辐射的波长范围

以太阳辐射能量强度为纵坐标,辐射波长为横坐标所绘制的太阳辐射能量强度随辐射波长变化的曲线称为太阳光谱曲线。太阳光谱中,各波长的能量很不相同,而且还和地点、时间、当地的气候条件等因素有关。因此,确定太阳光的能量值是很复杂的事情。为了得到计量的参考标准,人们定义了太阳常数这一物理量。

在地球的大气层外,与距太阳的距离为平均日地距离处,太阳在单位时间内投射到垂直于太阳光线方向的单位面积上的全部辐射能称为太阳常数,以 W/m^2 表示。换句话说,太阳常数就是大气层外日地平均距离处,垂直于太阳光线的表面上的辐射能通量。

太阳常数的数值十分重要。例如,太阳电池在空间应用时,人们必须知道准确的太阳常数才能进行太阳电池阵的设计。而当已知太阳辐射在大气中的减弱规律时,人们便由太阳常数找到地面上的太阳辐射值。

1981 年 10 月,世界气象组织仪器和观测方法委员会第八次会议确定太阳常数为 $1\,367 \text{ W}/\text{m}^2$ (或 $82\,000 \text{ J}/\text{cm}^2 \cdot \text{min}$)。在此之前, $1\,353 \text{ W}/\text{m}^2$ 数值也曾使用多年。

表 1.2 总结了一年内不同的日地距离上到达地球的太阳总辐照度的变化情况。在地面,每平方米可获得的最大太阳辐射能为 $1\,000 \text{ W}$ 左右。

表 1.2 一年内太阳总辐照度的变化

时 间	总辐照度/ $(\text{mW} \cdot \text{cm}^{-2})$	时 间	总辐照度/ $(\text{mW} \cdot \text{cm}^{-2})$
1 月 3 日(近日点)	139.9	7 月 4 日(远日点)	130.9
2 月 1 日	139.3	8 月 1 日	131.3
3 月 1 日	137.8	9 月 1 日	132.9
3 月 20 日(春分点)	136.5	9 月 23 日(秋分点)	134.5
4 月 1 日	135.5	10 月 1 日	135.0
5 月 1 日	133.2	11 月 1 日	137.4
6 月 1 日	131.6	12 月 1 日	139.2
6 月 21 日(夏至点)	131.0	12 月 22 日(冬至点)	139.8

地面上的情况要比空间复杂得多,因为地面上的任何地方都不可能排除大气的吸收,而大气吸收的状况又与太阳的位置和大气状态有关。为了描述大气吸收对太阳光谱的影响,常利用空气质量的概念(又称为大气质量)。

空气质量为太阳光线通过大气的路程与太阳在天顶(即直射头顶)时太阳光线通过大气的路程之比。例如,该比值为 1.5 时,就称空气质量为 1.5,通常写为 AM1.5。

在大气层外,空气质量为零,通常写为 AM0。太阳常数就是 AM0 条件下的太阳光光强。

在地面上,大气质量越大,对太阳光的吸收越严重,太阳光光强越弱。地面上每平方米可获得的最大光强约 1 000 W。

大气吸收还能改变太阳光光谱的能量分布,图 1.6 给出 AM0 和 AM1.5 的太阳光谱分布。

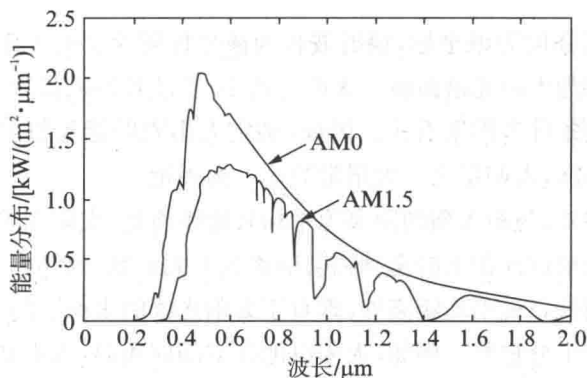


图 1.6 AM0 和 AM1.5 的太阳光谱分布

大气对太阳光的吸收除了受大气质量的影响,还与在大气中漂浮的尘埃、臭氧、水蒸气、二氧化碳、沼气以及人为污染等因素有关。

思考题

- (1) 何为太阳电池? 其发电机理是什么?
- (2) 画出常规硅太阳电池的结构图。
- (3) 写出太阳电池的电性能参数及其物理意义。
- (4) 太阳电池的特点? 适合哪些地方应用?
- (5) 何为太阳常数? 它的数据是多少?
- (6) 何为空气质量? 地面太阳光强与空气质量的关系如何?

第 2 章 半导体物理基本知识

2.1 半导体的晶格结构和特性

半导体单晶材料和其他固体材料一样,是由大量的原子(或离子)组成的,每 1 cm^3 体积中大约有 10^{23} 个原子。如此巨大数目的原子以一定方式排列,根据排列方式即固体结构的不同,人们将固体材料分为三大类:晶体、非晶体和准晶体。理想晶体中原子排列是十分有规则的,具有周期性或长程有序性。非晶体又称为无定型体,它的原子排列不具有长程的周期性。准晶体则介于晶体和非晶体之间,具有长程的取向序而没有长程的平移对程序。

晶体的一个基本特点是具有方向性,沿晶体的方向不同,沿不同晶向的晶面之间的距离也不同。为了区分和标志晶体中的不同方向,通常引入晶向和晶面的概念。将晶体中原子的排列抽象为布拉伐格子,其格点可以看成分列在一系列相互平行的直线上,这些直线称为晶列。每一个晶列定义一个方向,称为晶向。通常用晶向指数来表征晶向,如常见的 $[100]$ 、 $[110]$ 、 $[111]$ 晶向。布拉伐格子的格点还可以看成分列在平行等距的平面系上。这些平面称为晶面。通常用密勒指数来表征不同的晶面,如立方体晶格中常见的 (100) 、 (110) 、 (111) 晶面。根据晶体的对称性,可以将晶体分为三斜、单斜、正交、三角、四方、六角、立方七大晶系,一共包含 14 种布拉伐格子。

由于沿晶体的方向不同,性质也不同,称为各向异性。晶体的各向异性表现在晶体不同方向上的弹性模量、硬度、热膨胀系数、电阻率、磁化率和折射率等都是不同的。半导体晶体材料作为重要的晶体材料之一,其具有许多独特的物理性质,这与半导体中的电子状态及其运动特点有关。为了更好地了解和利用半导体的这些特性,本章将依次介绍半导体的晶体结构、电子运动状态以及有关的能带理论。

2.1.1 硅的晶体结构和特性

硅是最重要的半导体材料之一,在化学元素周期表中属于第 IV 族元素,原子的最外层具有 4 个价电子。大量的硅原子组合成晶体靠的是共价键结合,它的晶格结构与碳原子组成的一种金刚石晶格一样都属于金刚石型结构。这种结构的特点是:每个原子周围都有 4 个最近邻的原子,组成一个如图 2.1 所示的正四面体结构。这 4 个原子分别处在正四面体的顶角上,任一顶角上的原子和中心原子各贡献一个价电子为该两个原子所共有,共有的电子在两个原子之间形成较大的电子云密度,通过它们对原子实的引力把两个原子结合在一起,这就是共价键。这样,每个原子和周围四个原子组成四个共价键。上述四面体 4 个顶角原子又可以各通过 4 个共价键组成 4 个正四面体。如此推广,将许多正四面体累积起来就得到如图 2.1 所示的金刚石型结构,它的配位数是 4。

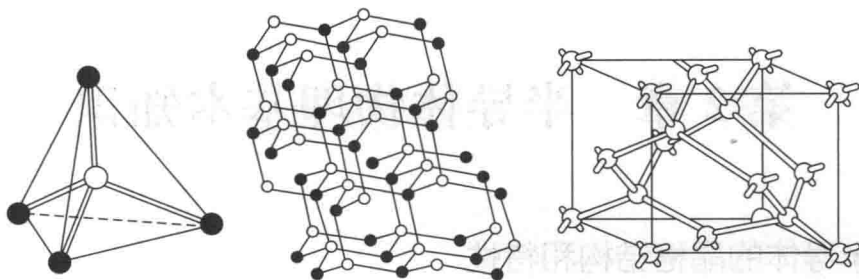


图 2.1 硅的金刚石型结构

在四面体结构的共价晶体中,四个共价键并不是以孤立原子的电子波函数为基础形成的,而是以 s 态和 p 态波函数的线性组合为基础,构成了所谓“杂化轨道”,即以一个 s 态和 3 个 p 态组成的 sp^3 杂化轨道为基础形成的,它们之间具有相同的夹角 $109^\circ 28'$ 。

金刚石型结构的结晶学原胞如图 2.1 所示,它是立方对称的晶胞。这种晶胞可以看成是两个面心立方晶胞沿立方体的空间对角线互相位移了 $1/4$ 的空间对角线长度套构而成。原子在晶胞中排列的情况是:8 个原子位于立方体的八个角顶上,6 个原子位于 6 个面中心上,晶胞内部有 4 个原子。立方体顶角和面心上的原子与这 4 个原子周围情况不同,所以它是由相同原子构成的复式晶格。它的固体物理学原胞和面心立方晶格的相同,差别只在于前者每个原胞中包含两个原子,后者只包含一个原子。

与硅同属于第 IV 族的半导体材料锗,其晶体结构和硅完全相同,二者的区别在于原子的间距即晶格常数不同。实验测得硅和锗的晶格常数分别为 0.357 nm 和 0.357 nm ,由此可知硅每立方厘米体积内有 5.00×10^{22} 个原子,锗有 4.42×10^{22} 个原子,两原子间最短距离:硅为 0.235 nm ,锗为 0.245 nm ,因而它们的共价半径分别为 0.117 nm 和 0.122 nm 。

2.1.2 砷化镓的晶体结构和特性

由化学元素周期表中的 III 族元素铝、镓、铟和 V 族元素磷、砷、锑合成的 III-V 族化合物,都是半导体材料,它们绝大多数具有闪锌矿型结构,与金刚石型结构类似,所区别的是前者由两类不同的原子组成。图 2.2 表示闪锌矿型结构的晶胞,它是由两类原子各自组成的面心立方晶格,沿空间对角线彼此位移 $1/4$ 空间对角线长度套构而成。每个原子被四个异族原子所包围,例如,如果角顶上和面心上的原子是 III 族原子,则晶胞内部四个原子就是 V 族原子,反之亦然。角顶上 8 个原子和面心上 6 个原子可以认为共有 4 个原子

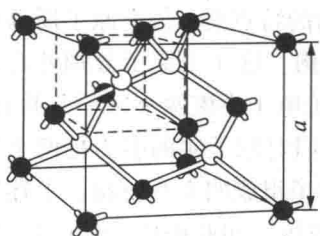


图 2.2 砷化镓的闪锌矿型结构

属于某个晶胞,因而每一晶胞中有 4 个 III 族原子和 4 个 V 族原子,共有 8 个原子。它们也是依靠共价键结合,但有一定的离子键成分。

与 IV 族元素半导体的情况类似,这类共价性的化合物半导体中,共价键也是以 sp^3 杂化轨道为基础的。但是,与 IV 族元素半导体相比有一个重要区别,这就是在共价性化合物晶体中,结合的性质具有不同程度的离子性,常称

这类半导体为极性半导体。重要的Ⅲ-V族化合物半导体材料砷化镓,相邻砷化镓所共有的价电子实际上并不是对等地分配在砷和镓的附近。由于砷具有较强的电负性,成键的电子更集中地分布在砷原子附近,所以在共价化合物中,电负性强的原子平均来说带有负电,电负性弱的原子平均来说带有正电,正负电荷之间的库仑作用对结合能有一定的贡献。在共价结合占优势的情况下,这种化合物倾向于构成闪锌矿结构。

2.2 能级和能带图

2.2.1 原子的能级和晶体的能带

制造半导体器件所用的材料大多是单晶体。单晶体由靠得很紧密的原子周期性重复排列而成,相邻原子的间距只有零点几纳米的数量级。因此,半导体中的电子状态肯定和原子中的不同,特别是外层电子会有显著的变化。但是,晶体由分立的原子凝聚而成,两者的电子状态又必定存在着某种联系:下面以原子结合成晶体的过程定性地说明半导体中的电子状态。

原子中的电子在原子核的势场和其他电子的作用下,它们分列在不同的能级上,形成所谓的电子壳层,不同壳层的电子分别用 $1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; 4s$ 等符号表示,每一支壳层对应于确定的能量。当原子相互接近形成晶体时,不同原子的内外各电子壳层之间就有了一定程度的交叠,相邻原子最外壳层交叠最多,内壳层交叠较少。原子组成晶体后,由于电子壳层的交叠,电子不再完全局限在某一个原子上,可以由一个原子转移到相邻的原子上,所以电子将可以在整个晶体中运动。这种运动称为电子的共有化运动。但需要注意的是,因为各原子中相似壳层上的电子才有相同的能量,电子只能在相似壳层间转移。因此,共有化运动的产生是由不同原子的相似壳层间的交叠,例如, $2p$ 支壳层的交叠, $3s$ 支壳层的交叠,如图 2.3 所示。也可以说,结合成晶体后,每一个原子能引起“与之相应”的共有化运动,例如, $3s$ 能级引起“ $3s$ ”的共有化运动, $2p$ 能级引起“ $2p$ ”的共有化运动等。由于内外壳层交叠程度很不相同,所以只有最外层电子的共有化运动才显著。

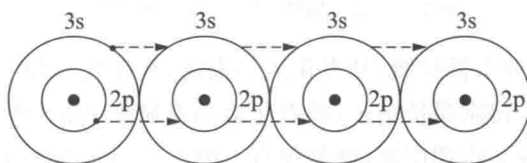


图 2.3 电子共有化运动示意图

晶体中电子作共有化运动时的能量是怎样的呢?先以两个原子为例来说明。当两个原子相距很远时,如同两个孤立的原子,原子的能级如图 2.4 所示,每个能级都有两个态与之相应,是二度简并的(暂不计原子本身的简并)。当两个原子互相靠近时,每个原子中的电子除了受到本身原子的势场作用,还要受到另一个原子势场的作用,其结果是每一个二度简并的能级都分裂为两个彼此相距很近的能级;两个原子靠得越近,分裂得越厉害。

图 2.4 示意地画出了 8 个原子互相靠近时能级分裂的情况。可以看到,每个能级都分裂为 8 个相距很近的能级。