

# 光伏电池 原理及应用

**SOLAR PHOTOVOLTAICS:  
WORKING PRINCIPLES AND APPLICATIONS**

王东 杨冠东 刘富德 编著



化学工业出版社

# 光伏电池原理及应用

王东 杨冠东 刘富德 编著

浙江工业大学  
图书馆藏书



浙江工业大学图书馆



72015054



化学工业出版社

· 北京 ·

光伏电池 原理及应用

5.82元



多种多样的光伏技术既有共性，也有其特异性。首先，光伏效应无一例外发生在具有半导体性质的两种材料的接触界面之间，产生的自由电荷通过在半导体材料中的输运到达电极和外电路，本书第1~3章阐述了半导体材料的一般性质以及接触界面发生的物理过程与原理，使读者对光伏电池的工作原理具备基础性的理解；其次，不同类别的光伏电池在材料性质、制备工艺、电池结构、组件应用等方面有很大的差异，第4~9章分别讲述了目前在产业领域和科研领域被普遍关注的几种光伏技术，包括晶体硅电池、硅薄膜电池、碲化镉电池、铜铟镓硒电池、有机电池和染料敏化电池，第10章则集中介绍了提高光伏电池效率的几种新理念、新技术；最后，结合光伏发电的实际案例，第11章提出电池与组件在系统真实应用中需要注意的问题，以期为读者在开发和使用时与实践相结合提供依据。

本书适合太阳能光伏技术领域的研究人员、技术人员阅读，也可作为相关专业高校师生的阅读参考书。

#### 图书在版编目(CIP)数据

光伏电池原理及应用/王东, 杨冠东, 刘富德编著.  
北京: 化学工业出版社, 2014.1  
ISBN 978-7-122-18737-6

I. ①光… II. ①王…②杨…③刘… III. ①光电  
池-研究 IV. ①TM914

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 248338 号

责任编辑: 戴燕红 郑宇印  
责任校对: 边涛

文字编辑: 丁建华  
装帧设计: 张辉

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)

印刷: 北京市振南印刷有限责任公司

装订: 三河市宇新装订厂

710mm×1000mm 1/16 印张 21 $\frac{1}{4}$  字数 402 千字 2014 年 1 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: 85.00 元

版权所有 违者必究

目 录

## 前 言

进入 21 世纪以来，全球对清洁能源的需求与日俱增。以太阳能光伏发电为例，最近十年全世界的光伏装机容量平均以每年 50% 的速度递增，截至 2011 年年底，全球累积光伏装机已达到 70GW。中国 2008 年当年光伏组件安装达到 40MW，之后呈现爆炸性增长，每年以 3~5 倍的速率递增，截至 2011 年年底全国累积光伏装机容量 3.3GW，自 2012 年开始的“十二五”规划中设定光伏安装量在“十二五”结束时至少达到 21GW。

尽管太阳能光伏发电已普遍被民众广泛接受，光伏组件的规模化利用趋势也优于其他可再生能源，但与传统化石能源和水力发电相比（三峡水电站总装机容量为 22.5GW），光伏发电的比例仍然很小，并且对晶体硅材料过度依赖，成本尚未建立优势，因此开发更清洁、更廉价、更高效的光伏电池技术仍然是一个紧迫的任务。世界多国政府一直把光伏技术研发列为国家能源战略和科技发展规划中的重要组成部分，大量的人力物力投入促使光伏技术在过去的二十年里取得了飞速进步。目前各类光伏电池不下二十种，最高实验室效率超过 40%，所用关键半导体材料涵盖无机、有机和高分子及纳米材料，制备工艺五花八门，电池形态也多种多样。其中晶体硅电池、非晶硅电池、碲化镉电池、铜铟镓硒电池均已实现大规模商业化生产，光伏行业直接从业人员近百万。

为了满足各类对光伏技术感兴趣的人士的需求，本书对多种光伏电池做了全面且有重点的介绍。首先本书归纳了光伏效应的基本原理和物理规律，让读者从理性上理解光电流、光电压产生的通用科学机制；随后通过讲述每一种电池的具体材料特性与制造工艺，使读者对主流光伏技术的应用现状和发展前景有初步的了解；最

后分析了光伏组件在实际系统应用中需要注意的问题，以便光伏研发人员在产品开发过程中更好地与实践相结合。笔者希望通过此书的出版，进一步普及太阳能光伏技术及其应用方面的知识，促进相关产业的发展。

本书第1至第3章由杨冠东负责编写，第4章、第5章、第10章由刘富德编写，其余章节由王东、苏志倩负责编写。本书在出版过程中得到北京大学李亚在文献调研方面的大力帮助，在此表示衷心的感谢。

编著者

2013年11月

## 前言

太阳能光伏发电技术作为清洁能源技术，在21世纪人类社会可持续发展中具有重要地位。随着全球能源危机的加剧，太阳能光伏发电技术已成为全球能源领域研究的热点。我国作为太阳能资源丰富的国家，大力发展太阳能光伏发电技术，对于实现能源结构的优化和可持续发展具有重要意义。本书旨在介绍太阳能光伏发电技术的基本原理、应用现状及发展趋势，为从事该领域的研究人员提供有益的参考。

本书共分10章。第1章介绍太阳能光伏发电技术的基本概念、分类及应用；第2章介绍太阳能电池的工作原理、材料及制备工艺；第3章介绍太阳能电池组件的封装工艺；第4章介绍太阳能光伏发电系统的组成及设计；第5章介绍太阳能光伏发电系统的并网技术；第6章介绍太阳能光伏发电系统的储能技术；第7章介绍太阳能光伏发电系统的监控系统；第8章介绍太阳能光伏发电系统的维护及故障排除；第9章介绍太阳能光伏发电技术的最新进展；第10章介绍太阳能光伏发电技术的未来展望。本书可作为从事太阳能光伏发电技术工作的工程技术人员、研究人员及高等院校相关专业师生的参考教材。

# 目 录

1	1 半导体材料	1
1.1	1.1 绝缘体, 半导体, 导体	1
1.2	1.2 半导体材料的晶体性质	2
1.2.1	1.2.1 半导体材料的晶格结构	3
1.2.2	1.2.2 常见太阳能电池材料的晶格结构	5
1.3	1.3 半导体能带	6
1.3.1	1.3.1 原子能级	6
1.3.2	1.3.2 能带的形成	8
1.3.3	1.3.3 波粒二象性	10
1.3.4	1.3.4 薛定谔方程	11
1.3.5	1.3.5 半导体中电子的能量与动量之间的关系	13
1.3.6	1.3.6 直接带隙和间接带隙半导体	15
1.4	1.4 半导体材料的掺杂	16
1.4.1	1.4.1 本征半导体	16
1.4.2	1.4.2 掺杂半导体	17
1.4.3	1.4.3 杂质能级的计算	19
1.5	1.5 载流子分布	21
1.5.1	1.5.1 费米分布	21
1.5.2	1.5.2 玻耳兹曼分布	24
1.6	1.6 载流子浓度	25
1.7	1.7 载流子的产生与复合	30
1.7.1	1.7.1 载流子的产生	30



1.7.2	载流子的复合 .....	34
1.8	载流子输运 .....	39
1.8.1	载流子连续性方程 .....	39
1.8.2	载流子的扩散和漂移 .....	40
	参考文献 .....	41
<b>2</b>	<b>半导体接触 .....</b>	<b>43</b>
2.1	半导体 pn 结 .....	43
2.1.1	pn 结的形成 .....	43
2.1.2	pn 结中的空间电荷区 .....	43
2.1.3	pn 结的能带 .....	44
2.1.4	pn 结的电流电压特性 .....	48
2.1.5	pn 结击穿 .....	55
2.2	半导体异质结 .....	58
2.2.1	异型异质结 .....	59
2.2.2	同型异质结 .....	60
2.3	金属半导体接触 .....	61
2.3.1	金属半导体接触势垒 .....	61
2.3.2	半导体表面态 .....	63
2.3.3	金属半导体接触的电流输运理论 .....	64
2.3.4	整流接触与欧姆接触 .....	66
2.4	其他半导体接触 .....	68
2.4.1	$n^+p^+$ 隧穿结 .....	68
2.4.2	有机半导体材料异质结 .....	68
2.5	太阳能电池的分类 .....	69
	参考文献 .....	71
<b>3</b>	<b>太阳能电池基本原理 .....</b>	<b>72</b>
3.1	太阳光谱与太阳辐射 .....	73
3.2	光照下的 pn 结 .....	76
3.2.1	光照下 pn 结的电流电压特性 .....	78
3.2.2	光照下 pn 结的量子效率谱 .....	81
3.2.3	pn 结各参数对量子效率的影响 .....	82
3.3	表征太阳能电池的主要参数 .....	86
3.4	太阳能电池的效率极限 .....	89
3.4.1	太阳能电池极限效率的计算 .....	89
3.4.2	太阳能光谱对太阳能电池极限效率的影响 .....	90
3.4.3	半导体带隙与太阳能电池极限效率 .....	91

3.5	太阳能电池的其他结构	92
3.5.1	异质结太阳能电池	92
3.5.2	p-i-n 结太阳能电池	93
3.6	太阳能电池组件和系统	94
3.7	太阳能电池原理小结	95
	参考文献	97
<b>4</b>	<b>晶体硅太阳能电池</b>	<b>98</b>
4.1	晶体硅太阳能电池的基本结构	98
4.2	晶体硅材料的性质	100
4.3	晶体硅太阳能电池设计	101
4.3.1	太阳能电池中半导体材料的掺杂	101
4.3.2	太阳能电池中基区与发射区的厚度	104
4.3.3	太阳能电池表面	108
4.3.4	电极	109
4.3.5	光吸收	114
4.4	晶体硅太阳能电池的制造	118
4.4.1	晶体硅的制备	118
4.4.2	结的形成	122
4.4.3	前表面钝化与减反射层沉积	124
4.4.4	表面接触的制作	124
4.5	多晶硅太阳能电池	127
4.6	其他结构晶体硅太阳能电池	130
4.6.1	背面点接触太阳能电池	130
4.6.2	HIT 太阳能电池	131
	参考文献	132
<b>5</b>	<b>硅薄膜太阳能电池</b>	<b>134</b>
5.1	引言	134
5.2	材料的性质和制备	137
5.2.1	非晶硅薄膜材料的性质与制备	137
5.2.2	微晶硅薄膜材料的性质和制备	140
5.2.3	多晶硅薄膜材料的性质和制备	143
5.3	器件设计	152
5.3.1	非晶硅及微晶硅太阳能电池结构	152
5.3.2	多晶硅薄膜太阳能电池结构设计	158
	参考文献	161
<b>6</b>	<b>碲化镉光伏电池</b>	<b>163</b>



6.1	碲化镉电池介绍 .....	163
6.2	碲化镉电池发展历史 .....	164
6.3	碲化镉的物理化学性质 .....	166
6.4	碲化镉薄膜沉积 .....	172
6.4.1	Cd 和 $\text{Te}_2$ 蒸气在表面的冷凝/反应 .....	173
6.4.2	Cd 和 Te 离子在表面的电化反应 .....	175
6.4.3	前驱物表面反应 .....	175
6.5	碲化镉薄膜电池结构 .....	176
6.5.1	窗口层 .....	176
6.5.2	CdTe 吸收层和 $\text{CdCl}_2$ 处理 .....	177
6.5.3	CdS/CdTe 互扩散 .....	181
6.5.4	背接触 .....	184
6.5.5	碲化镉电池的表征与分析 .....	186
6.6	碲化镉组件 .....	191
6.7	碲化镉薄膜电池展望 .....	193
	参考文献 .....	196
<b>7</b>	<b>铜铟镓硒光伏电池 .....</b>	<b>202</b>
7.1	铜铟镓硒光伏电池基本情况介绍 .....	202
7.2	铜铟镓硒的材料性质 .....	205
7.2.1	结构与成分 .....	206
7.2.2	光学性质和电子结构 .....	208
7.2.3	电学性质 .....	209
7.2.4	表面和晶界 .....	211
7.2.5	衬底效果 .....	213
7.3	铜铟镓硒的沉积方法 .....	213
7.3.1	衬底和钠加入 .....	214
7.3.2	背接触 .....	215
7.3.3	共蒸发 $\text{Cu(InGa)Se}_2$ .....	215
7.3.4	预制层反应工艺 .....	218
7.3.5	其他沉积方法 .....	220
7.4	铜铟镓硒电池器件制备 .....	220
7.4.1	化学水浴沉积 (CBD) .....	220
7.4.2	界面效应 .....	222
7.4.3	其他沉积方法 .....	223
7.4.4	其他缓冲层 .....	223
7.4.5	透明导电层 .....	225

7.4.6	高阻窗口层 .....	226
7.4.7	器件完成 .....	227
7.5	铜铟镓硒电池的性能评价 .....	227
7.5.1	光生电流 .....	228
7.5.2	复合 .....	230
7.5.3	Cu(InGa)Se <sub>2</sub> /CdS 界面 .....	234
7.5.4	宽带隙和渐变带隙器件 .....	235
7.6	铜铟镓硒电池的量产问题 .....	238
7.6.1	工艺和设备 .....	238
7.6.2	组件制造 .....	240
7.6.3	组件行为和稳定性 .....	241
7.6.4	生产成本 .....	243
7.6.5	环境问题 .....	244
7.7	铜铟镓硒电池技术展望 .....	245
	参考文献 .....	246
<b>8</b>	<b>有机光伏电池</b> .....	<b>256</b>
8.1	有机和高分子光伏效应的原理 .....	256
8.1.1	有机材料的光电响应过程 .....	256
8.1.2	有机/高分子材料的光伏过程 .....	259
8.2	有机和高分子光伏电池的演化和类型 .....	263
8.2.1	有机单层光伏电池(肖特基电池) .....	263
8.2.2	双层施主/受主异有机质结光伏电池(唐氏电池) .....	264
8.2.3	体异质结有机光伏电池 .....	266
8.2.4	N型纳米颗粒/纳米棒与p型高分子复合型光伏电池 .....	268
8.2.5	双连续有序纳米结构有机光伏电池(BONS) .....	269
8.2.6	串联结构的有机光伏电池 .....	269
8.2.7	“理想”高效有机光伏电池 .....	272
8.3	有机和高分子光伏电池的制备和表征 .....	272
8.3.1	有机和高分子光伏电池的制备和稳定性 .....	272
8.3.2	OPV产业的现状和挑战 .....	274
8.3.3	小结和展望 .....	275
	参考文献 .....	275
<b>9</b>	<b>染料敏化太阳能电池</b> .....	<b>278</b>
9.1	染料敏化太阳能电池基本原理 .....	278
9.1.1	染料敏化太阳能电池背景介绍 .....	278
9.1.2	染料敏化太阳能电池工作机理 .....	279

9.2	染料敏化太阳能电池的结构与材料	282
9.2.1	TCO 电极	282
9.2.2	金属氧化物半导体	283
9.2.3	染料 (光敏剂)	286
9.2.4	氧化还原电解质	290
9.2.5	对电极	292
9.2.6	封装材料	292
9.3	染料敏化太阳能电池的发展与应用	292
9.3.1	染料敏化太阳能电池的稳定性	293
9.3.2	染料敏化太阳能电池的商业使用	294
9.3.3	染料敏化太阳能电池组件的工业生产	295
9.3.4	纤维状染料敏化太阳能电池	295
	参考文献	297
<b>10</b>	<b>高效新概念太阳能电池</b>	<b>301</b>
10.1	太阳能电池效率分析	301
10.2	叠层太阳能电池	303
10.3	中间带太阳能电池	307
10.4	上转换器和下转换器	311
10.5	热载流子太阳能电池	312
10.5.1	热载流子能量分析	312
10.5.2	热载流子太阳能电池结构	317
10.6	碰撞电离太阳能电池	318
10.7	热光伏太阳能电池和热光子转换器	321
	参考文献	322
<b>11</b>	<b>光伏组件在发电系统中的应用</b>	<b>323</b>
11.1	光伏组件自身成本及其对 BOS 的影响	324
11.2	光伏组件对系统发电量的影响	326
11.2.1	光伏组件结构对系统发电量的影响	326
11.2.2	系统中光伏组件的一致性对系统发电量的影响	328
11.2.3	光伏组件类型对系统发电量的影响	329
11.3	光伏组件的安全性	333
11.4	光伏组件能量回收期	334
11.5	光伏组件的回收	334
11.6	光伏发电系统的经济性	335



# 1 半导体材料

## 1.1 绝缘体，半导体，导体

材料的电导率 $\sigma$ 反映了电子在材料中自由移动的能力。电导率的倒数即为电阻率 $\rho$ ，反映了材料对电子运动的阻力。根据材料所处电阻率的范围不同，可以将自然界中的材料大致分为导体、半导体、绝缘体。电阻率低于 $10^{-4}\Omega\cdot\text{cm}$ 的材料为导体，处于 $10^4\sim 10^9\Omega\cdot\text{cm}$ 范围内的为半导体，高于 $10^9\Omega\cdot\text{cm}$ 的即为绝缘体。常见的导体包括各种金属，如 Al、Cu、Fe 等；半导体主要包括 IV 族材料 Si、Ge 和 III-V 族及 II-VI 族化合物等，如 GaAs、GaN、ZnO 等；绝缘体包括的范围很广，如玻璃、石英、氧化镍、硫、纯水等都属于绝缘体。

半导体材料的导电性在不同的掺杂浓度、温度以及光激发状态下都可以产生很大的差异，而这些影响因素都是可以人为控制的。于是，人们便可以在很大范围内控制材料的光电性质，而半导体材料也成为现代电子器件中最为重要的材料。

表 1.1 给出了半导体器件中最广为利用的元素。目前，Si 和 GaAs 应用最为广泛，其中 GaAs 可以视为 Ga 和 As 的合金，在固体状态下没有毒性。InP 和 GaN 在光电器件中占有重要的位置，例如 LED 芯片就是由 GaN 晶体制成。III-V 族化合物半导体与 Si 的光电性质略有不同，例如大多数 III-V 族化合物为直接带隙半导体，而 Si 为间接带隙半导体。III-V 族化合物半导体在高速电子器件，光电子器件等方面有着重要应用。Si 除了在传统电子器件中广泛使用，还是在太阳能电池领域使用最多的材料。

表 1.1 半导体材料常用元素

主族 周期	II	III	IV	V	VI
2		B 硼	C 碳	N 氮	O 氧
3	Mg 镁	Al 铝	Si 硅	P 磷	S 硫
4	Zn 锌	Ga 镓	Ge 锗	As 砷	Se 硒
5	Cd 镉	In 铟	Sn 锡	Sb 锑	Te 碲
6	Hg 汞		Pb 铅		

## 1.2 半导体材料的晶体性质

半导体材料的电学性质不仅受到掺杂浓度、温度的影响，更决定于其结晶性质。通常可以把固体半导体材料划分为单晶、多晶和非晶（图 1.1）。单晶材料兼具长程有序和短程有序，晶体内原子排列具有对称性和周期性，整个材料的晶体取向也是单一的。多晶硅材料仍然具有短程有序性，但是长程无序。而非晶材料则表现为长程、短程均无序。采用不同的材料制备方法可以获得有序程度不同的材料，对于硅而言，人们通常使用提拉法或区熔法制备单晶硅。另外，材料在不同温度下，其有序度会发生变化。一般而言，有序度越高的材料，电子运动所受到的各种阻力越小，材料电性能越好。因此，制备性质优良的结晶程度高的半导体材料一直都是人们关注的课题，例如，很多研究人员正在致力于将非晶或微晶硅薄膜太阳能电池发展至多晶硅薄膜太阳能电池。

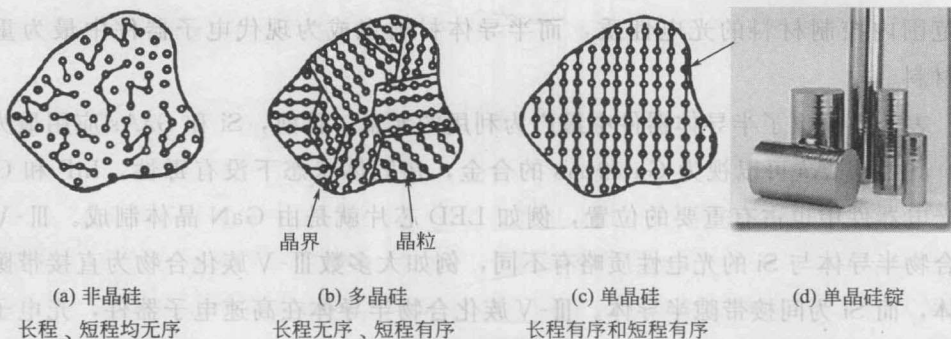


图 1.1 非晶硅、多晶硅、单晶硅的原子排列有序性

## 1.2.1 半导体材料的晶格结构

晶体的一个重要特征就是原子的周期性排列，其可以借用空间点阵来进行描述。可以找到一个晶体结构的最小单元，通过重复它便可以还原整个晶格排列，而这个最小单元就称为原胞（图 1.2）。三个矢量  $a$ 、 $b$ 、 $c$  为原胞矢量，晶格中的每一个格点都可以通过这三个基矢表示：

$$\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$$

式中， $m$ 、 $n$ 、 $p$  均为整数。

在不同的晶面，晶体的电学、力学、热学性质都会各有不同。所谓晶面，即晶体内原子组成的平面。材料在不同的晶面上性质的不同，主要在于原子在不同晶面上排列不同。不同的晶面可以通过密勒指数  $(hkl)$  表示。密勒指数是晶面在晶格坐标轴上截距的倒数的最简整数比。密勒指数代表了一组相互平行的原子面。

图 1.2 晶格原胞

原子在晶体中的不同排列形成了不同的晶格结构。不同的材料原子间距不同，但是它们仍然可以具有相同的晶格结构。下面介绍几种常见的晶格结构<sup>[1]</sup>。

### (1) 简单立方 (simple cubic, sc)

简单立方晶格结构是最简单的晶格结构，相同的每个原子分别占据立方体的每一个角，便形成了简单立方晶格结构，如图 1.3 (a) 所示。也可以从另外一个角度理解简单立方结构，在一个平面上，原子如图 1.4 所示按照最简单的方式排列形成原子层，相同的原子层在纵向位置上以相同的方式不断重复堆叠，最后便形成了

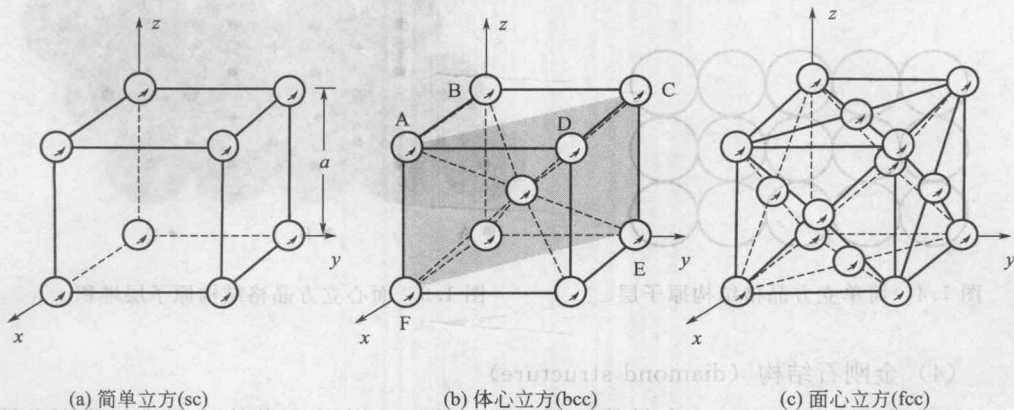


图 1.3 简单立方、体心立方、面心立方晶格结构



简单立方结构。如果用 A 表示第一原子层的位置，简单立方的堆叠结构可以表示为 AA...AA。简单立方结构虽然简单，但是却很不稳定，因为这种原子排列方式没有把材料的能量降到最低。因而，自然界很少有材料是这种结构，目前在自然界中只观察到了钋 (Po) 的  $\alpha$  相为简单立方晶格结构<sup>[1]</sup>。

### (2) 体心立方 (body-centered cubic, bcc)

体心立方晶格结构与简单立方结构唯一的区别是在立方体的中心多了一个同样的原子 [图 1.3 (b)]。从原子层堆叠的角度，体心立方结构也是由如图 1.4 所示的原子层堆叠而成，不同的是第二层原子并不与第一层原子的位子重合，而是对应于第一层原子的原子间隙。按照这样的方式循环重复堆叠，便可以得到体心立方结构。如果用 B 表示上一层原子的间隙位置，则体心立方结构可以表示为 ABAB...ABAB。体心立方结构相比简单立方结构稳定很多，很多金属，如 Li、Na、K、Fe、W、Mo 等，都具有体心立方结构。

### (3) 面心立方 (face-centered cubic, fcc)

在立方体的八个角和六个面的中心各安放一个相同的原子，便形成了面心立方结构 [图 1.3 (c)]。面心立方结构属于密排结构，它的原子层如图 1.5 所示，排列最为紧密，形成密排面。原子层在纵向上可以选择如图 1.5 所示三个位置进行堆叠，包括第一层原子所在的位置 A，第一层原子的一类空隙 B 和另一类空隙 C。如果原子层按照 ABCABC 的方式堆叠，便可以得到面心立方结构。若原子按照 ABAB 的方式堆叠，便可以得到另一种密排结构——六角密排晶格 (图 1.6)。由于密排结构比较稳定，很多金属都具有密排结构。如属于面心立方的有 Au、Ag、Cu、Al、Ni 等；属于六角密排的有 Mg、Zn、Ti 等。

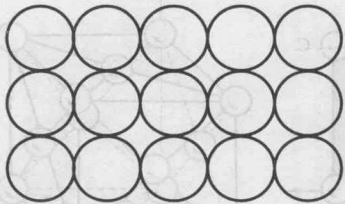


图 1.4 简单立方晶格结构原子层

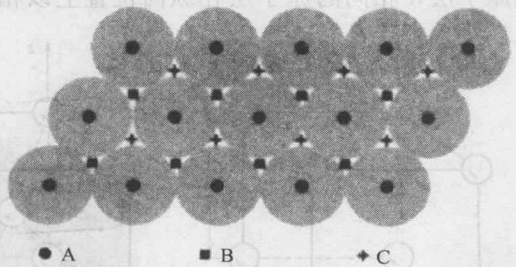


图 1.5 面心立方晶格结构原子层堆积

### (4) 金刚石结构 (diamond structure)

金刚石结构是在面心立方结构的基础上，在立方体的四条体对角线上分别安放四个相同的原子，其中两个原子位于两条相邻对角线的  $1/4$  处，另外两个原子位于

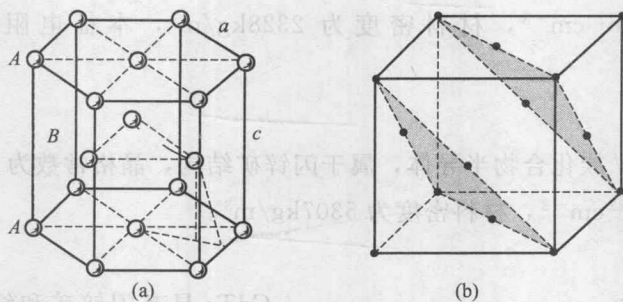


图 1.6 六角密排晶格结构 (a) 和面心立方晶格结构 (b)

剩下的两条对角线的  $3/4$  处 (图 1.7)。也可以将 4 条对角线划分为从体心出发的 8 条  $1/2$  对角线, 4 个原子分别位于 4 条不相邻的  $1/2$  对角线的中心。对于金刚石结构, 每个原子都处于它最近的四个原子形成的四面体的中心。值得注意的是, 处于四面体中心的原子和四面体顶点上的原子是不等价的。金刚石结构是一种非常重要的结构, 除了金刚石为该结构外, 半导体材料 Si 和 Ge 也都是金刚石结构。

#### (5) 闪锌矿结构 (zinc blende structure)

闪锌矿结构与金刚石结构非常类似, 唯一不同的是闪锌矿结构中, 对角线上的原子与面心立方位置上的原子不是同一种原子 (图 1.8)。例如 GaAs 为闪锌矿结构, 当 Ga 离子占据面心立方位置时, As 离子占据对角线上的位置。具有闪锌矿结构的晶体还包括 ZnS、ZnSe、CuCl 等等。另外, 很多 III-V 族化合物也具有闪锌矿的结构, 如 InSb<sup>[2]</sup>。

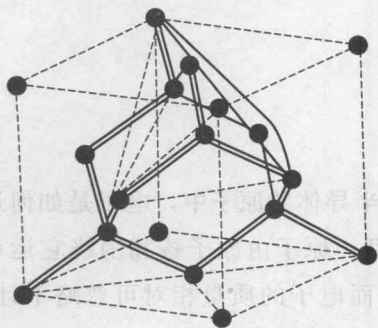


图 1.7 金刚石结构

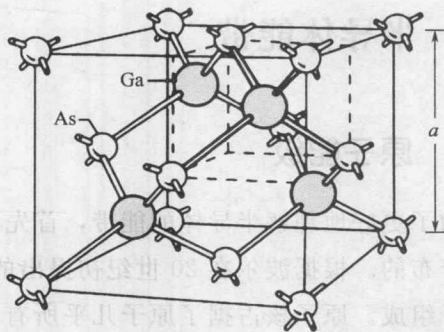


图 1.8 闪锌矿结构

## 1.2.2 常见太阳能电池材料的晶格结构

### (1) Si

单晶硅为金刚石结构, 晶格常数为  $0.357\text{nm}$ , 原子半径为  $0.118\text{nm}$ , 原子

密度为  $5.02 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ，材料密度为  $2328 \text{ kg/m}^3$ ，本征电阻率约为  $2.3 \times 10^5 \Omega \cdot \text{cm}^{[3]}$ 。

(2) GaAs

GaAs 为 III-V 族化合物半导体，属于闪锌矿结构，晶格常数为  $0.357 \text{ nm}$ ，原子密度为  $4.42 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ，材料密度为  $5307 \text{ kg/m}^3$ 。

(3) CdTe

CdTe 具有闪锌矿和纤锌矿两种晶格结构，但在常温下人们获得的多为闪锌矿结构的 CdTe 晶体，包括 CdTe 薄膜太阳能电池中的 CdTe 晶体。闪锌矿的 CdTe，晶格常数为  $0.357 \text{ nm}$ ，材料密度为  $5860 \text{ kg/m}^3$ 。

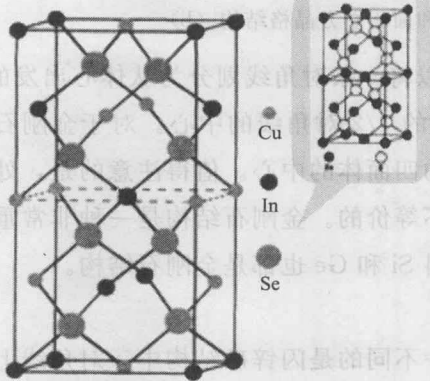


图 1.9 CuInSe<sub>2</sub> 黄铜矿晶格结构

CuInSe<sub>2</sub> 晶体属于黄铜矿结构 (图 1.9)，晶格常数  $a=0.357 \text{ nm}$ ， $c=1.154 \text{ nm}$ ，但是随着 Ga 的掺入，晶格常数会随之发生变化。

(4) CIGS

铜铟镓硒实际上是 CuInSe<sub>2</sub> 和 CuGaSe<sub>2</sub> 的固溶晶体，可以认为是 Ga 代替了 CuInSe<sub>2</sub> 晶体中的部分 In 而形成。

CuInSe<sub>2</sub> 晶体属于黄铜矿结构 (图 1.9)，

## 1.3 半导体能带

### 1.3.1 原子能级

为了更好地理解半导体的能带，首先了解组成半导体的原子中，电子是如何运动和分布的。根据波尔在 20 世纪初提出的原子模型，原子由原子核和围绕它运动的电子组成。原子核占据了原子几乎所有的质量，而电子的质量相对可忽略不计。但是原子核的半径却比原子壳层的半径小很多，原子核的半径属于  $10^{-15} \text{ m}$  量级，原子壳层的半径为  $10^{-10} \text{ m}$  量级。原子核带正电，它由带正电的质子和电中性的中子组成；电子壳层带负电；整个原子呈电中性。若按照经典理论，带负电的电子受到带正电的原子核的吸引力，围绕原子核做周期运动，电子所受离心力与静电力达到平衡，速度不同的电子拥有不同的能量和运动半径 (图 1.10)。

但是，该理论会遇到一个很大的问题，电子和原子核之间组成了电偶极子，电