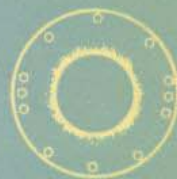
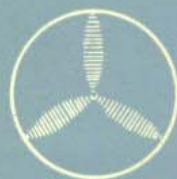


半导体晶体的定向切割

赵正旭 编著



科学出版社

半导体晶体的定向切割

赵正旭 编著

科学出版社

内 容 简 介

本书首先简单介绍晶体取向的表示方法,然后着重叙述晶体的解理法定向、光图象法定向和X射线定向三种定向切割方法,并对具体操作方法作了较为详细的叙述。最后还概略地介绍了切割机器和极性的确定方法。

本书可供从事晶体定向切割、半导体材料和器件制作的工人和科技人员参考。

半导体晶体的定向切割

赵正旭 编著

*

科学出版社出版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1979年4月第 一 版 开本: 787×1092 1/16
1979年4月第一次印刷 印张: 9 1/2 插页: 1
印数: 0001—30,600 字数: 213,000

统一书号: 13031·978

本社书号: 1380·13—3

定价: 0.95 元

前 言

自然界的一切固体物质,按其原子或分子的排列,可以分为两大类,即晶体和非晶体。晶体和非晶体的根本区别,在于晶体的组成有一定的规律性,即晶体是由许多质点(包括原子、分子、离子或原子团等)在三维空间作有规则排列而形成的固体物质。晶体可以单晶体存在,也可以由许多小的单晶粒聚集成多晶体。

在自然界中存在很多天然单晶体,如石英、方解石、白云石等。另一方面,随着科学技术的发展,人造单晶体的种类也越来越多,质量越来越高。目前单晶体在科学技术和工农业生产上都有着极其重要的意义和应用。

单晶体具有一种独特的各向异性的性能,即在同一块单晶体的不同方向上,它的一些性质,例如强度、热膨胀系数、导电性能、光学性能、熔(溶)解性能等,是不相同的。要全面了解晶体的性质,必须首先知道晶体在各个方向上的性质差异,由此选出对于应用最有利的方向。晶体定向切割的目的,就是在一块晶体上按照所选定的晶向准确地对晶体进行加工切割。

本书以目前最常用的元素半导体材料硅单晶和化合物半导体材料砷化镓单晶为例,介绍三种主要的定向切割方法。这些方法在原则上也适用于其它一些晶体,可以根据具体情况,按照书中介绍的定向原理和晶体本身的特性分别处理。本书还介绍了半导体晶体切割机的概况,比较了几种切割机器的优缺点,可以根据具体要求选用合适的切割机器。由于 III-V 族化合物半导体在 $\langle 111 \rangle$ 方向上存在着极性,所以也简略地介绍了确定极性的方法。此外,对于和晶体定向有关的磷砷化镓外延层组份的测定及晶体表面损伤层深度的测定等,我们已列入附录中。

本书总结了近年来我们对晶体定向切割的一些实际经验,以供从事晶体定向切割的科技人员参考。由于我们的工作范围比较狭窄,实践经验和科学知识也不够,书中不免会存在各种缺点和错误,希望读者提出宝贵意见。

本稿在编写过程中,承中国科学院上海冶金研究所 X 光组许顺生、姜小龙、杨传铮同志审阅原稿、提供 X 光劳厄照相法定向的实验分析实例,北京有色金属研究院康君笃同志、吉林大学王贤仁同志协助看过原稿,并提出了宝贵意见,作者谨向他们表示谢意。

编著者

1977 年 5 月

目 录

第一章 晶体定向的意义	(1)
一、对单晶制造方面的影响	(1)
二、对外延生长方面的影响	(1)
三、对器件制造方面的影响	(2)
四、对管芯划片方面的影响	(2)
第二章 晶体取向的表示方法	(4)
第一节 晶面和晶面指数	(4)
第二节 晶面的投影表示	(8)
一、球面投影和极射赤面投影	(8)
二、乌尔夫网和晶面间的角度测量	(10)
第三章 解理法定向	(15)
第一节 定向原理	(15)
第二节 解理插针法定向	(18)
第三节 解理测角法定向	(20)
一、定向测角仪	(20)
二、测角方法	(20)
三、三维转动台	(21)
四、定向操作步骤	(22)
第四节 $\{110\}$ 晶面的解理法定向	(25)
第五节 $\langle 112 \rangle$ 取向籽晶的解理法定向	(25)
一、砷化镓单晶的生长特性	(25)
二、水平区熔砷化镓单晶采用 $[112]$ 方向生长的原因	(27)
三、 $\langle 112 \rangle$ 取向籽晶在石英舟中的正确放置方位	(28)
四、 $\langle 112 \rangle$ 取向籽晶定向	(30)
第四章 光图象法定向	(32)
第一节 定向原理	(32)
第二节 晶体断面的处理	(33)
一、机械处理	(33)
二、化学处理	(36)
第三节 光图象定向仪	(36)
第四节 定向操作步骤	(37)
第五节 $\langle 111 \rangle$ 长苞硅单晶籽晶的定向切割	(39)
第六节 半导体晶片的最佳划片方位	(44)
一、硅、砷化镓 $\langle 111 \rangle$ 、 $\langle 100 \rangle$ 取向晶片最佳划片方位的选择	(44)
二、基准平面在单晶柱面上的确定方法	(46)

三、在单晶柱面上研磨基准平面的具体操作步骤	(52)
第七节 从一个晶面到另一个任意晶面的定向切割	(53)
第八节 半导体硅片的标准化条件	(56)
一、硅片直径	(56)
二、硅片厚度	(56)
三、硅片基准面的选择	(57)
四、硅片取向和导电类型的宏观表示	(57)
五、硅片的晶体取向准确度	(58)
六、硅片的平行度和弯曲度	(58)
第五章 X射线定向	(60)
第一节 基本原理	(60)
第二节 X射线照相法定向	(63)
一、劳厄衍射斑点	(64)
二、极射赤面投影点的指数化方法	(70)
三、调整晶体取向的方法	(75)
第三节 单色X射线衍射法定向	(78)
一、定向原理	(78)
二、一般定向程序	(79)
三、X射线定向仪简介	(79)
四、用X射线定向仪定向的应用举例	(86)
第六章 切割机概况	(94)
第一节 内圆切割机	(94)
一、内圆切割机的构造	(94)
二、内圆切割刀片的安装	(97)
三、内圆切割机操作要点	(98)
四、内圆切割机的优缺点	(99)
第二节 往复式切割机和导丝切割机	(100)
一、往复式切割机的构造	(101)
二、操作要点	(101)
三、往复式切割机的优缺点	(102)
第三节 外圆切割机	(102)
第四节 超声波加工机	(103)
第五节 微电子束切割机	(104)
第七章 极性的确定方法	(105)
第一节 用荧光X射线确定极性	(105)
第二节 用化学腐蚀法确定极性	(106)
第三节 用光图象确定极性	(108)
附录	(109)
一、立方晶体晶面间的夹角	(109)
立方晶体某些高指数晶面间的夹角	(110)
二、六方晶体晶面间的夹角	(111)

三、立方晶体和六方晶体的几个标准极射赤面投影图	(111)
四、关于区熔法生长砷化镓单晶的生长棱线	(121)
五、几种主要半导体材料的常用化学腐蚀剂	(126)
六、MOS 晶体管及其固体电路在制造中基片取向的考虑	(130)
七、结构因数	(131)
八、用 X 射线衍射法测定砷化镓衬底上外延生长磷砷化镓层的组份	(131)
九、半导体晶体表面加工损伤层深度的测定	(136)
十、YX-1 型 X 射线定向仪电气原理图	(139)
十一、YX-1 型 X 射线定向仪记录放大器电气原理图	(140)
十二、内圆切割机电器原理图	(140后)
十三、元素周期表	(142)
十四、锗、硅和 III-V 族化合物半导体材料主要物理性能表	(143)
参考文献	(144)

第一章 晶体定向的意义

由于单晶体具有一种独特的各向异性性质,在使用晶体时必须按一定方向来切割,才能达到较好的应用效果。为此必须首先知道晶体的取向,以及各个取向上的晶体性质。

同一块晶体,由于切割方向不同,可以得到完全不同的效果。例如,图 1.1 的压电石英晶体属于六方晶系¹⁾,Z 轴称为光轴, a_1, a_2, a_3 轴称为电轴; b_1, b_2, b_3 轴称为机械轴。像上图那样垂直于 a_3 轴切割的晶体薄片称为 X 切片,或称为居里切片。它具有负的温度系数,温度每上升 1°C ,用它作成的石英振荡器的频率约减小百万分之 10 到 25。像下图那样与机械轴 b_2 垂直切割的晶体薄片称为 Y 切片,或称为 30° 切片。它具有正的温度系数,温度每上升 1°C ,用它作成的石英振荡器的频率约增加百万分之 25 到 100。采取特殊切割法——AT 切割时,这样切成的晶片制成的石英振荡器的温度系数在室温附近接近于零,即振荡器的频率几乎不随温度而变化。

半导体晶体的各向异性,对半导体材料和器件的制造有着十分严重的影响,归纳起来,有以下几个方面:

一、对单晶制造方面的影响

用直拉法生长单晶体,必须首先准备一块一定取向的籽晶(一般选用 $\langle 111 \rangle, \langle 100 \rangle$ 或 $\langle 110 \rangle$ 取向的籽晶),用它来引拉晶体方能获得位错密度较低、完整性较好的单晶。否则,就不易获得单晶体,而生长出多晶或孪晶,而且生长的晶体的电学性能也不好。例如,在用水水平区熔法生长砷化镓单晶时,我们过去一直没有采用籽晶生长,而是令其自然成晶,结果出晶率一直不高,晶体质量也比较差。后来,采用了籽晶拉制工艺,大大提高了单晶的出晶率,晶体的质量也有所改善。

二、对外延生长方面的影响

在硅外延生长中,我们发现在不同取向的晶面上外延淀积的速率是不同的。最慢的生长方向是 $\langle 111 \rangle$ 方向(我们的观察结果和其他结果是基本一致的^[1])。因此,在准确的 (111) 衬底上进行外延生长时,不仅淀积速率慢,而且外延层表面容易出现生长棱锥;当衬底片的取向偏离准确 (111) 面一定角度时(一般朝着最靠近 (111) 面的一个 (110) 面偏过 3° 左右),在同样生长条件下外延淀积速率较快,而且外延层的表面质量也较好。在砷化镓汽相外延生长中,我们曾采用过 $(111)A, (111)B, (100)$ 和 (110) 这几个晶面进行外延

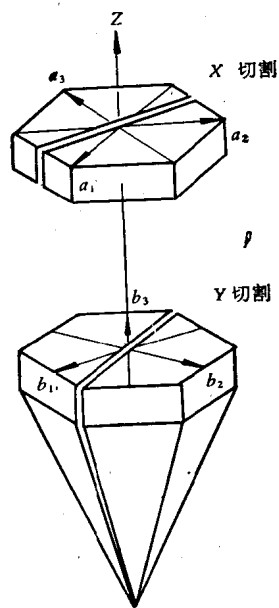


图 1.1 压电石英晶体的 X 切割和 Y 切割

1) 实际上它属于菱形晶系。菱形晶系的晶面一般用六方晶系指数化。

生长,发现(111)A和(111)B面上的外延淀积效果较差,片子表面很容易出现很多三角形的棱锥小丘。这可能是因为(111)A和(111)B面存在极性,外延生长时镓原子和砷原子需交替地分层排列所引起的。而在(110)晶面上外延生长效果较好,其生长速率较快。这可能是在(110)晶面上镓原子和砷原子的数目相同,相邻晶面间的键密度较小,外延生长时镓砷原子不用分层交替排列所引起的。而在(100)晶面上外延淀积速率较慢,其效果较(110)略差一些。但是,由于器件生产往往都需要(100)晶面,我们仍采用了(100)晶面进行外延生长。但是在准确的(100)面上进行外延生长时,其外延生长速率较慢,且外延层表面也不大好。若使(100)晶面朝着与它相垂直的某一个{110}晶面偏过一定的角度(3° — 5°),不仅外延淀积速率可提高,而且外延层表面也较好,片子的生长参数也易于控制。

三、对器件制造方面的影响

我们生产砷化镓隧道二极管时选用了{111}晶面的基片,因为{111}晶面上的原子密度较大,在进行烧结时易于获得具有平整前沿的突变结。在生产实践中发现, $\langle 111 \rangle$ 方向的极性严重地影响着器件生产的成品率。如果在($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)晶面上进行烧结,不仅管芯的烧结成品率低,而且它的电学参数也较差;反之,若在(111)晶面上进行烧结,不仅管芯的烧结成品率高,而且它的电学参数也较好。

我们曾经做过这样的实验:在制造砷化镓隧道二极管的水平区熔砷化镓单晶的定向切割中,定向切割时发现晶体尾部出现了双晶。经定向仪检查,未经定向的那部分晶体偏离(111)晶面约 20° 。我们将这样切割下来的双晶片投到器件生产线上,并在生产线上对有着不同晶向偏离的同一块片子进行同样条件的加工处理,最后在管芯划片时按其晶向的偏离分成两组。管芯的电学参数测试表明:晶向偏离大的一组管芯不仅电学参数较差,而且成品率很低,经老化筛选后还发现这些管芯的电参数有较大的退化,而另一组管芯在各个方面都比前一组好得多。

我们生产砷化镓激光二极管时对晶体基片晶向的要求是十分严格的。(100)晶面的晶向准确度要求达到 $2'$ — $3'$ 。实践证明,砷化镓基片的晶向准确度对器件性能的影响是十分严重的。当基片的取向准确度大于 $2'$ — $3'$ 时,管子的发光效率会大大下降,有时晶向偏离太大则不能发出激光。这是因为在腔体中产生的激光需要在两个垂直于晶体表面的平行解理面之间来回多次反射,以获得能量的增强再发射出去。当两个平行解理面不和晶体表面很好地垂直时,腔体中来回反射的激光就不能很好地获得能量的增强,因此发射出去的激光的能量就不大,甚至使腔体中产生的激光不能发射出去。

四、对管芯划片方面的影响

在我们最初生产砷化镓开关二极管时,曾经认为晶体基片的取向对器件的性能影响不大,因此,对器件用的砷化镓基片没有经过定向切割。但后来在管芯划片工序上发现划片成品率时高时低,但经常是很低的。后来采用了(100)晶面的定向切割基片,使划片成品率得到了很大的提高。同时器件生产的重复性也有所改进。

对于硅器件,我们采用了 $\langle 111 \rangle$ 取向的基片。原来在管芯划片时是在大圆片上任选一个方向进行,这样划片成品率是较低的。后来我们在单晶棒定向切割之前,先在柱面上

定向研磨出一个(110)基准面。于是在切割之后每块片子上有一个基准划片方位。在器件生产时就以此基准方位为准来安排管芯的位置。在划片时，划片劈刀按此基准方位走向，这样可使划片工序的管芯划片成品率得到很大提高。

从以上的实践，使我们体会到，从半导体材料的制备到器件的制作，一直到管芯的划片，都需要考虑晶体取向的影响。目前我们生产的各种半导体器件的基片都经过了定向切割。但各种器件对晶体取向准确度的要求是不同的。晶体基片的取向方向和取向准确度的要求，要根据各种器件本身的性质来决定。有的要求沿(100)晶面切割，有的要求沿(111)晶面切割，有的需要较高的取向准确度，有的需要晶片的取向朝某方向偏离一定角度。对一般在工艺上没有特殊要求的器件，我们使晶体基片的取向准确度都控制在 1° 以内，这一方面考虑到不影响器件的制作，另一方面，这样的取向准确度也比较容易达到。

第二章 晶体取向的表示方法

第一节 晶面和晶面指数

为了准确地表示出地球上某处的地理位置,人们采用了经度和纬度来作为坐标。这样我们就能方便而迅速地确定某城市、某山脉、某岛屿等在地球上所处的位置。这个坐标系对于从事地理勘测、航空、航海等方面工作的人员来说是十分有用的,甚至是必不可少的。

在晶体学上,为了明确地表示出晶体中某些原子、分子或原子团等所组成的平面,或某些原子、分子或原子团等所指示的方向,人们也选用了适当的坐标系来表示晶体中各族平面的位置、方向等,从而我们也能方便而迅速地确定出各个平面族的方向和位置。这种坐标系对于从事晶体制造或晶体应用等方面工作的人员也是十分有用的,甚至也是不可缺少的。这种坐标系统的建立需根据晶体的结构特性来确定。

在晶体学上,人们选取了与宏观晶体有着同样对称性的平行六面体来作为晶胞(构成晶体的最小单元,参看图 2.1)。选取晶胞三个相交于一点的棱线为晶轴,并用 X, Y, Z 表示。

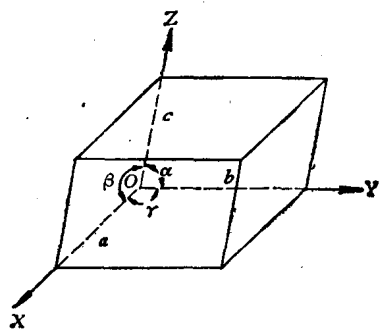


图 2.1 晶胞

沿 X, Y, Z 轴方向上的单位矢量用 a, b, c 表示;三个晶轴间的夹角为 α, β, γ ;单位矢量 a, b, c 的长度用 a, b, c 表示,它通常被称为点阵常数(或称为晶格常数)。晶轴方向的正、负号是这样规定的:在原点 O 的右、上和前方者为正,反之为负。三条晶轴按右手螺旋定则来确定。

根据晶胞的六个参数可将晶体分为七个晶系:

(1) 立方(或等轴)晶系: $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, 晶胞体积 $v = a^3$ 。

(2) 四方(或正交)晶系: $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, 晶胞体积 $v = a^2 \cdot c$ 。

(3) 六方(或六角)晶系: $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$, 晶胞体积 $v = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a^2 \cdot c$ 。

(4) 正交晶系: $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, 晶胞体积 $v = a \cdot b \cdot c$ 。

(5) 三方(或菱形)晶系: $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$, 晶胞体积

$$v = a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}.$$

(6) 单斜晶系: $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$, 晶胞体积 $v = \sin \beta \cdot abc$ 。

(7) 三斜晶系: $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ 。

在晶体中通过若干结点(原子、分子或原子团等所处的位置)可构成一个平面,该平面和 X, Y, Z 轴相交于 A, B, C 三点,这样的平面称为晶面(或称点阵平面),如图 2.2 所

示。如果每一节点是一个原子,则这个平面称为原子平面。一般晶面都是用密勒指数(或称晶面指数)来表示。密勒指数就是一个平面在各晶轴上截距的倒数再取分母的最小公倍数进行通分后的分子数字,即截距之倒数的整数比。例如在图 2.2 中 S 平面在 X, Y, Z 轴上的截距分别是 2, 4, 2。由于我们仅对平面的方向感兴趣,所以用较小的截距 1, 2, 1 描述更为方便(实际上 1, 2, 1 和 2, 4, 2 所确定的平面是相互平行的)。它们的倒数是 $1/1, 1/2, 1/1$ 。通分后其分子数为 2, 1, 2, 我们就用符号 (212) 作为 S 平面的晶面指数。如果 S 平面是平行于 Z 轴的,那末它将会在无穷远处和 Z 轴相交。此时它在 X, Y, Z 轴上的截距就是 1, 2, ∞ 。因此它的晶面指数就是 (210) 。负的晶面指数表示晶面和晶轴的负方向相截,一般在数字上加一横来表示。例如图 2.2 中的 K 晶面和 X, Y, Z 轴的截距为 $-2, 2, 2$, 其晶面指数表示为 $(\bar{1}11)$ 。

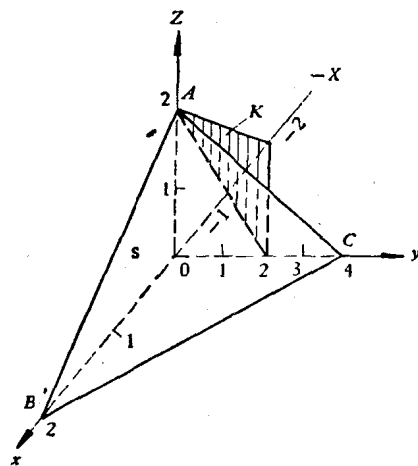


图 2.2 晶面指数的表示方法

晶体中任意两节点间连线所指的方向称为晶向。它和通过坐标原点的平行矢量的方向一致,常用 $[uvw]$ 符号表示。 u, v, w 是平行矢量上任意一点在 X, Y, Z 坐标上坐标位置的最小整数比。例如 $[210]$ 晶向就可视为从坐标原点到坐标 2, 1, 0 点连线的方向。一般 $[h_1 k_1 l_1]$ 晶向是不垂直于 $(h_1 k_1 l_1)$ 晶面的。只有三轴正交晶体和某些特殊情形的晶面[例如六方晶系的 $(00l)$]的情况下 $[h_1 k_1 l_1]$ 晶向是垂直于 $(h_1 k_1 l_1)$ 晶面的。图 2.3 表示立方晶体中几个晶面和晶向的关系。

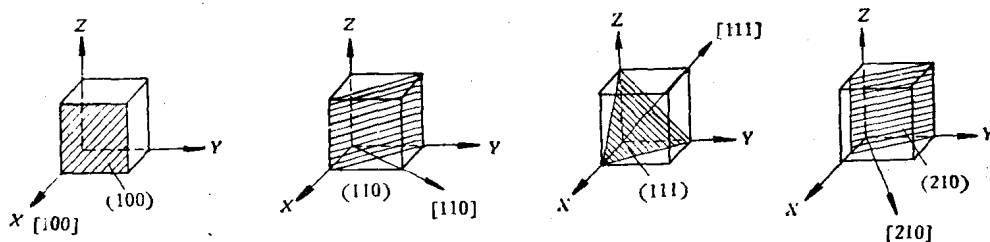


图 2.3 立方晶体中几个晶面和晶向的关系

两个平面 (hkl) 和 $(h_1 k_1 l_1)$ 的交线方向 $[uvw]$ 可用晶面指数的交叉乘积之差很方便地求得:

$$\begin{aligned} u &= kl_1 - lk_1 \\ v &= lh_1 - hl_1 \\ w &= hk_1 - kh_1 \end{aligned}$$

h	k	l	h	k	l
	$\swarrow$	$\searrow$	$\swarrow$	$\searrow$	
	$\nwarrow$	$\nearrow$	$\nwarrow$	$\nearrow$	
h_1	k_1	l_1	h_1	k_1	l_1

而 $[uvw]$ 就是这两个平面所属晶带的晶带轴指数。平行于某一给定方向的所有平面就构成一条晶带,该方向就是各个平面所构成晶带的晶带轴。

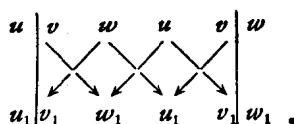
用类似的关系可求出相应两个晶带轴 $[uvw]$ 和 $[u_1 v_1 w_1]$ 所构成的平面 (hkl) 。

$$h = vw_1 - wv_1$$

即

$$k = wu_1 - uw_1$$

$$l = uv_1 - vu_1$$



如果 (hkl) 晶面是平行于 $[uvw]$ 方向的则有

$$uh + vk + lw = 0.$$

符号 $\{hkl\}$ 表示满足晶体对称性要求的所有等效晶面。为了要知道在某种形式下有多少等效晶面,就必须知道晶体的对称性。例如

$$\{100\}_{\text{立方晶体}} = (100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1}),$$

$$\{100\}_{\text{四方晶体}} = (100)(010), (\bar{1}00)(0\bar{1}0).$$

具有同一种形式的所有晶面称为结晶学等效面,它们有着相同的物理性质(极性半导体晶体除外)。实际上,通过坐标的转动,可把原来坐标中的 (100) 晶面变成新坐标中的 $(00\bar{1})$ 晶面。

符号 $\langle hkl \rangle$ 和 $[hkl]$ 也有类似的关系,它表示满足晶体对称性要求的所有等效晶向。例如

$$\langle 111 \rangle_{\text{立方晶系}} = [111], [\bar{1}11], [1\bar{1}1], [11\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}1], [\bar{1}1\bar{1}], [1\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}].$$

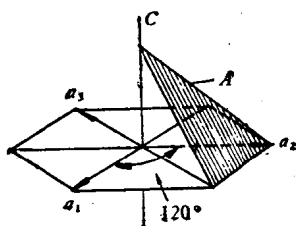


图 2.4 六方晶系中的结晶学轴

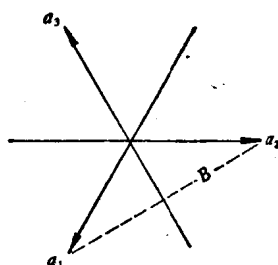


图 2.5 六方晶系中平行于 C 轴的晶面 $(11\bar{2}0)$

在六方晶系中有四个结晶学轴。其中有三个长度相等,彼此间夹角为 120° 的水平轴,

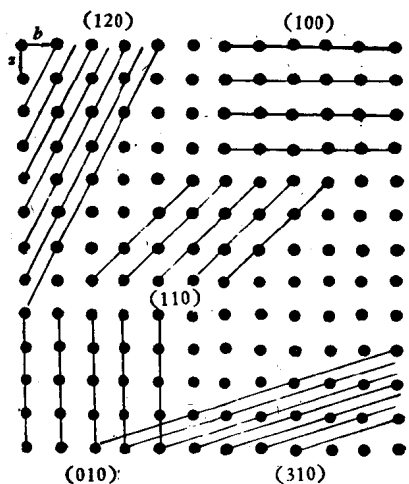


图 2.6 正交晶体点阵中平行于 Z 轴的几个晶面的晶面间距和原子密度情况

一个具有不同长度的垂直轴。因此一个晶面就会有四个指数 $(hkil)$ 。图 2.4 中 a_1, a_2, a_3 为水平轴, C 为垂直轴。平面 A 截 a_1 在无穷远处(即和 a_1 平行),截 a_2 为 $+1$,截 a_3 为 -1 ,截 C 为 $1/2$,因此它的晶面指数是 $(01\bar{1}2)$ 。图 2.5 中另一平面 B 截 a_1 和 a_2 都为 $+1$,截 a_3 为 $-1/2$,截 C 于无穷远处。它的晶面指数为 $(11\bar{2}0)$ 。由上面两种情况我们可看到:第三个符号 i 是前面两个符号之和的负数,即 $i = -(h + k)$ 。因此六方晶系的晶面指数也可用三个指数表示,第三个指数可用一圆点代替,有时圆点也可略去。对上述的两个晶面则可表示的 (012) 和 (110) 。

晶体中最邻近的两个平行晶面间的距离称为晶面间距。晶面指数最低的晶面总是具有最大的

晶面间距。所以在点阵常数 a, b, c 相近的一些晶体中,属(100), (010), 和(001)这类晶面的晶面间距最大, 其值分别等于 a, b, c 。对于简单点阵, 在这些晶面上的格点密度也最大¹⁾。图 2.6 表示平行于 Z 轴的几个晶面的晶面间距和格点密度的情况。从图中可看出(100)晶面的晶面间距为 a , (010)晶面的晶面间距为 b 。它们的原子密度和晶面间距都要比(120), (110)和(310)大。

晶体的晶面间距通常用字母 d 表示。各个晶系的晶面间距可通过矢量运算求出, 其结果如下:

$$(1) \text{ 立方晶系 } \frac{1}{d_{(hkl)}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}.$$

$$(2) \text{ 四方晶系 } \frac{1}{d_{(hkl)}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}.$$

$$(3) \text{ 六方晶系 } \frac{1}{d_{(hkl)}^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}.$$

$$(4) \text{ 正交晶系 } \frac{1}{d_{(hkl)}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}.$$

$$(5) \text{ 单斜晶系 } \frac{1}{d_{(hkl)}^2} = \frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2hl \cos \beta}{ac \sin^2 \beta}.$$

$$(6) \text{ 三方晶系 } \frac{1}{d_{(hkl)}^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2(1 - 3\cos^2 \alpha + 2\cos^3 \alpha)}.$$

(7) 三斜晶系应用极少, 从略。

晶体中各晶面族之间的夹角也有相应的计算公式。设 H, K, L 为一族晶面的三个晶面指数, h, k, l 为另一族晶面的三个晶面指数。{HKL}和{hkl}之间的夹角 δ ²⁾ 可表示为:

$$(1) \text{ 立方晶系 } \cos \delta = \frac{Hh + Kk + Ll}{\sqrt{H^2 + K^2 + L^2} \cdot \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}.$$

立方晶体的某些主要晶面(或晶向)间的夹角数值列于附录一中。

$$(2) \text{ 六方晶系 } \cos \delta = \frac{\frac{4}{3a^2}[Hh + Kk + \frac{1}{2}(Hk + Kh)] + \frac{Ll}{c^2}}{\sqrt{\frac{4}{3a^2}(H^2 + K^2 + HK) + \frac{L^2}{c^2}} \cdot \sqrt{\frac{4}{3a^2}(h^2 + k^2 + l^2) + \frac{l^2}{c^2}}}.$$

六方晶体晶面间的夹角数值列于附录二中。从附录二可看出, 对于同样结构的两种晶体(例如镁和锌都属六方晶系结构), 由于 c/a 值不同, 所以有同样指数的(HKL)晶面和(hkl)晶面间的夹角并不相等。

$$(3) \text{ 四方晶系 } \cos \delta = \frac{\frac{Hh + Kk}{a^2} + \frac{Ll}{c^2}}{\sqrt{\frac{H^2 + K^2}{a^2} + \frac{L^2}{c^2}} \sqrt{\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}.$$

对其它晶系应用较少, 故此处从略。

1) 对于复杂结构的晶体点阵不一定这样。例如金刚石结构的晶体, 原子密度最大的晶面是{111}晶面。

2) 在同一种晶体中 {HKL} 和 {hkl} 有几个等效晶面。故同样符号的 {HKL} 和 {hkl} 晶面间的夹角可能有好几种。见附录一。

第二节 晶面的投影表示

在晶体定向工作中,往往需要把在三维空间分布的各个晶面反映到二维纸面上来。这样能使各晶面族间的对称关系和各晶面间的夹角关系变得显而易见,因此使定向工作变得更简单方便。特别是在X射线照相法定向中,晶体的各个晶面族对入射连续X射线产生衍射。衍射线落在二维照相底片上就形成许多感光斑点,每一个斑点就对应着一组平行晶面。在实际定向工作中就是依据这种衍射斑点间的关系来求各个空间点阵平面的取向的。因此晶面的投影表示十分重要。

一、球面投影和极射赤面投影

图 2.7 表示放置在一个球体中心的立方晶体。对晶体的每个晶面作法线并和球体表面相交于一点,这些点称为“极点”。所有极点的集合称为晶体的球面投影。因为球心的晶体的体积相对球体是很小的,因此,即使生长条件的影响使晶体在某方向伸长或压平,极点的位置基本不变。各个晶面间的位置关系就可用它们的极点来表示。

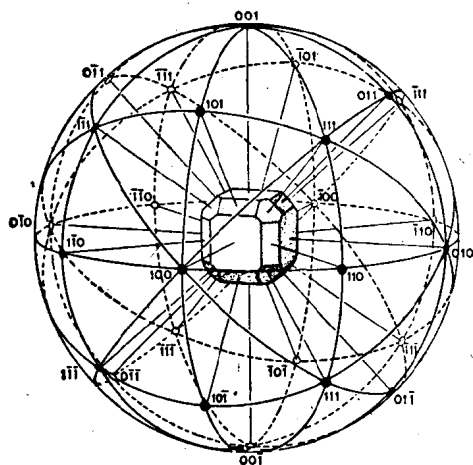


图 2.7 晶体的球面投影

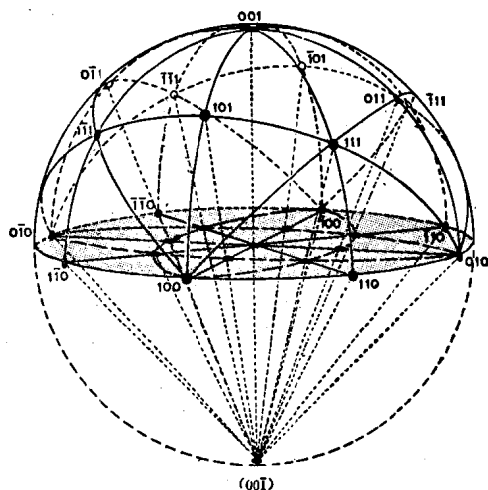


图 2.8 晶体的球面投影转换为极射赤面投影

晶体的球面投影仍然是立体关系,还需更进一步把它转换到二维平面上来。极射赤面投影法就是把晶面或晶向的三维关系表示在二维平面上的一种方法。在图 2.8 中,将球面投影的极点 $(00\bar{1})$ 和上半球的每一个极点相联结,这些联结线和上半球的底(即赤道平面,亦称为极射赤面投影面)相交而产生了一系列交点,这些交点就是上半部晶面的极射赤面投影(图 2.9)。把它和图 2.7 比较,它好似从晶体顶部向下看到的图形。垂直向上正对视线的极点,正好落在投影图形的中心位置上;处在赤道线上的极点,正好落在投影图形的圆周上;而倾斜平面的极点,则落在它们之间。这样极射赤面投影图上的每一个投影极点就表示一组相互平行的晶面,各投影极点间的距离就表示相应晶面法线间的夹角。投影极点之间的角度测量方法将在后面叙述。图 2.9 的投影只是晶体上半部各极点在极射赤面投影面上的投影图形。而下半部各极点应和图 2.8 一样向上进行投影(与前面投影过

程相反,用(001)极点和晶体的下半部各极点相联结)。由于晶体在此方向上有一对称平面,所以上下两部份的投影恰好重合,其投影图形完全相同。

图 2.10 是包括很多晶面的立方晶体,以(001)晶面为投影面的极射赤面投影图(简称极图)。在晶体定向工作中,一些常用晶面的标准极射赤面投影图是十分重要的。因为在这些标准投影图上很容易看出某一组晶面(或晶向)与另外一组晶面(或晶向)间的夹角关系,以及某一组晶面(或晶向)与另外几组有关晶面(例如解理面等)之间的对称关系。附录三是立方晶体和六方晶体以几个常用晶面为投影面的标准极射赤面投影图。绘制这些图是根据晶体的对称性和各组晶面间的夹角(可用前一节所述的公式来计算)来进行的。而低指数晶面(或晶向)间的夹角数值和对称关系在晶体定向工作中尤为重要。

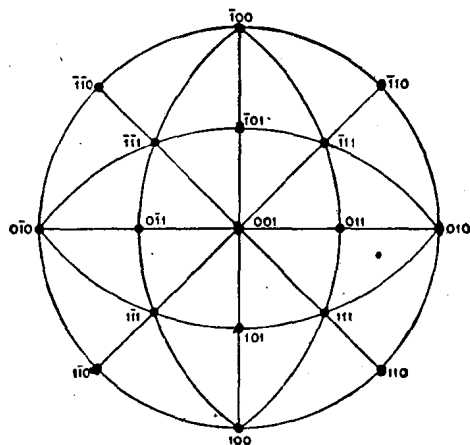


图 2.9 晶体的简化极射赤面投影

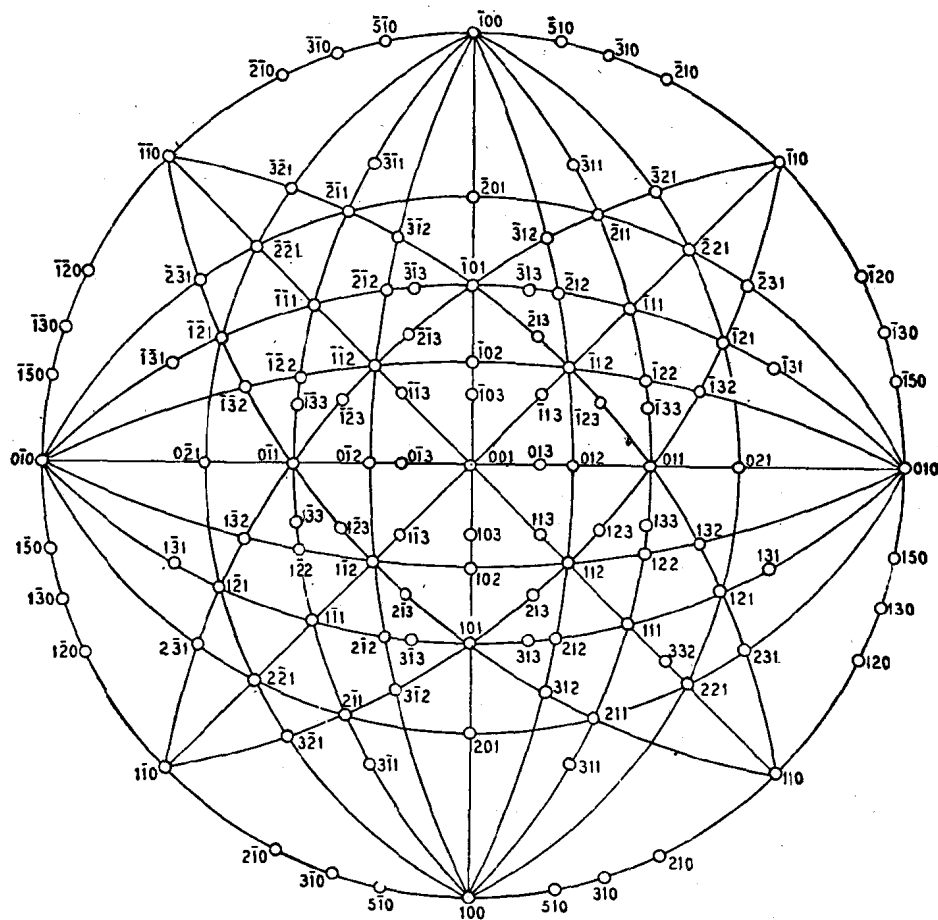


图 2.10 立方晶体沿(001)晶面的极射赤面投影图

图 2.11 中若球面上某一极点 X 与 P' 之间的角距离(球面投影上, 任两个极点间的距离称为角距离, 它代表着相应两个晶面法线间的夹角)为 γ , 则 X 点在极射赤面投影面上的投影点 X' 与投影圆心 O 之间的距离 S 可用下面公式(1)求出. 图 2.11 所表示的圆是一个通过 P, P' 及 X 点的大圆, 它与极射赤面投影平面相垂直. 从图中的几何关系可求出

$$S = OP \tan \frac{\gamma}{2} = R \tan \frac{\gamma}{2}, \quad (1)$$

式中 R 为投影圆半径.

根据上式可直接从极射赤面投影上的投影极点计算出各晶面间的角距离来. 但是在实际定向工作中很少直接用此公式来计算, 而采用适当的测量网格(乌尔夫网, 见图 2.13)来完成各晶面间的角距离测量. 这要比用公式计算方便得多.

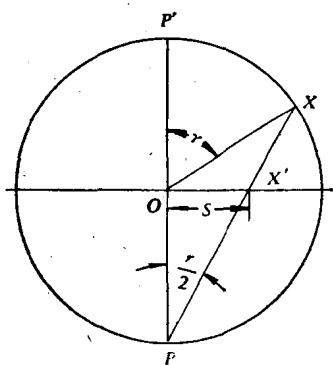


图 2.11 求极射赤面投影上 S 值的几何关系



图 2.12 画有经度和纬度线的圆球

二、乌尔夫网和晶面间的角度测量

我们把一个画有经度和纬度的球(图 2.12)用前述的方法投影到平行于 SN 轴的一个平面上去, 则可得到如图 2.13 所示的极射赤面投影网——乌尔夫网(简称乌氏网). 它和地球一样也有从上到下走向的经度线和从左到右的纬度线. 把经度线划分成 90 个分格或 180 个分格, 每一个分格就表示 2° 或 1° ; 纬度线也可划分成 90 个分格或 180 个分格, 每一个分格也表示 2° 或 1° . 因此可用此网格来测量晶面间的夹角. 如前所述, 极射赤面投影图上一个点(一组平行晶面的投影)就表示一组晶面, 各点之间的距离就表示各晶面法线间的夹角. 因此, 只要把一张极射赤面投影图描在半透明描图纸上, 使投影图的直径与乌氏网相同. 把描图纸放到乌氏网上, 让它们的中心重合, 并在中心上插一根大头针. 转动乌氏网(或转动投影图), 使所要测量的点都落在乌氏网的同一条经度线上或赤道(大圆投影)上, 立刻就可十分方便地通过乌氏网读出相应晶面间的夹角来.

从图 2.14 中可以看出, 如果两个投影极点位于同一经度线上, 则测量角度 C 就是该二晶面法线间的夹角. 如果两个投影极点处在两条经度线上或同一条纬度线上, 则纬度线上的夹角就不表示二晶面法线间的夹角了, 如图 2.14 所示 $\angle A \neq \angle B$. 为了能在极射赤面投影网上读出任意两个晶面间的夹角, 就必须使极射赤面投影图上的投影极点能相对乌氏网转动, 使所讨论的晶面的投影极点都落在同一经度线上, 然后就可沿此经度线读出它们间的角度数来.

从图 2.7 可看出, 如果这里的一族法线都绕晶体的南北轴(或 SN 轴)转过一个角度(相