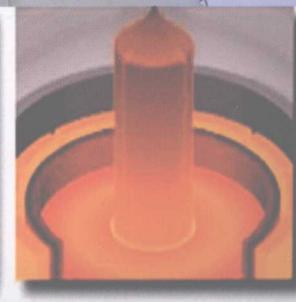
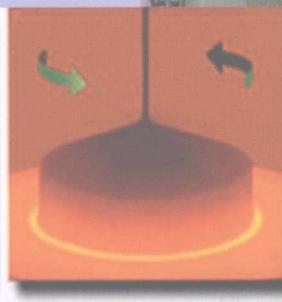
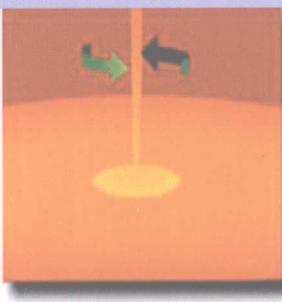
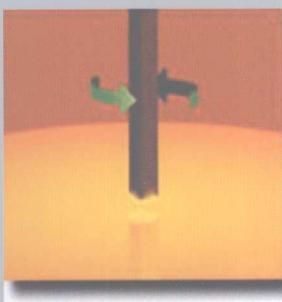
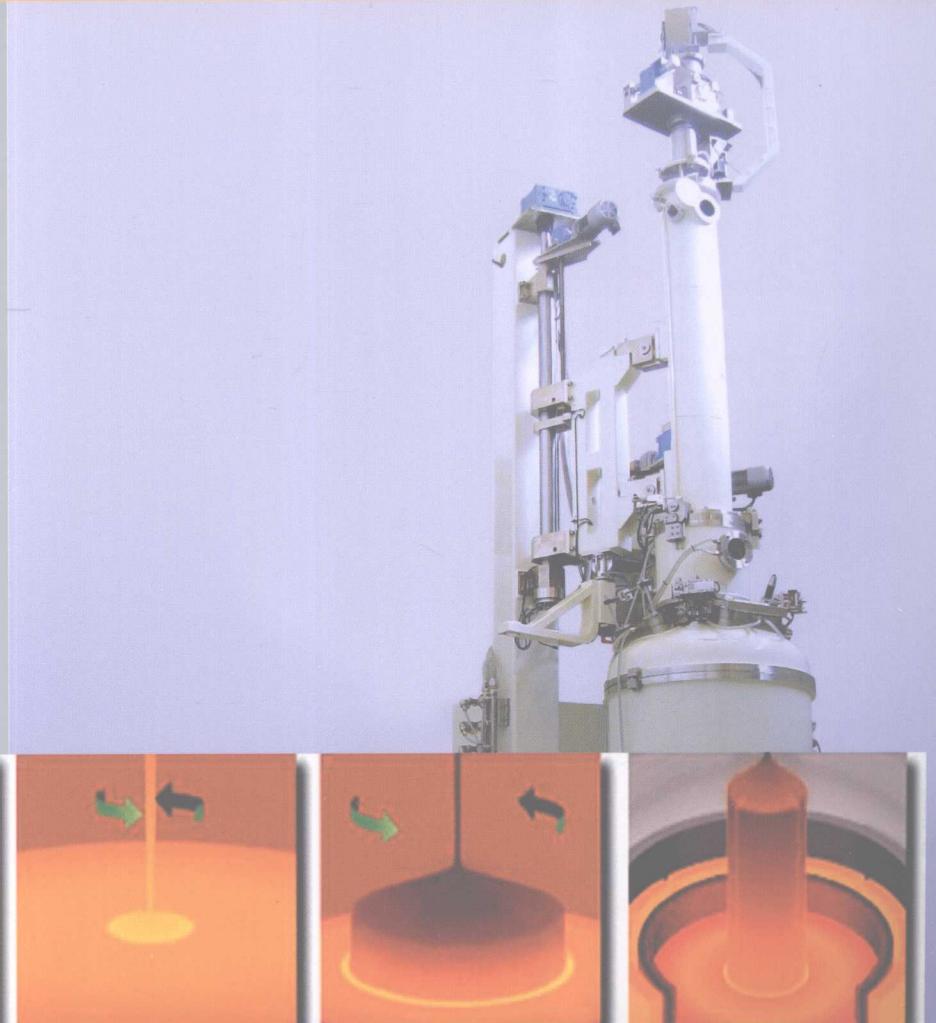


太阳能光伏产业——硅材料系列教材

直拉单晶硅工艺技术

黄有志 王丽 主编



化学工业出版社

太阳能光伏产业——硅材料系列教材

直拉单晶硅工艺技术

黄有志 王丽 主编
黄玫 邓永智 主审



化学工业出版社

·北京·

本书共 8 章，包括：单晶硅的基本知识、直拉单晶炉、直拉单晶炉的热系统及热场、晶体生长控制器、原辅材料的准备、直拉单晶硅生长技术、铸造多晶硅工艺、掺杂技术等内容。

本书可作为高职高专太阳能光伏产业硅材料技术专业的教材，同时也可作为中专、技校和从事单晶硅生产的企业员工的培训教材，还可供相关专业工程技术人员学习参考。

直拉单晶硅工艺技术

主编 王志 吴黄
副主编 黄晓娟 刘黄

图书在版编目 (CIP) 数据

直拉单晶硅工艺技术/黄有志，王丽主编. —北京：
化学工业出版社，2009.7
太阳能光伏产业——硅材料系列教材
ISBN 978-7-122-05500-2

I. 直… II. ①黄…②王… III. 半导体材料-单晶
拉制-生产工艺-教材 IV. TN304.053

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2009) 第 067769 号

责任编辑：张建茹

文字编辑：鲍晓娟

责任校对：陈 静

装帧设计：郑小红

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：北京永鑫印刷有限责任公司

装 订：三河市万龙印装有限公司

787mm×1092mm 1/16 印张 8 1/4 字数 194 千字 2009 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：25.00 元

版权所有 违者必究

太阳能光伏产业——硅材料系列教材

编审委员会

主任：陈元进

副主任：周应胜

委员：(按汉语拼音排序)

陈元进 邓 丰 邓永智 何 燕 黄刚娅

黄 玮 黄有志 康伟超 乐栋贤 李志伟

刘 斌 刘秀琼 潘家平 唐正林 王 丽

王晓忠 巫显会 徐筱跃 杨 岷 易正义

尹建华 张和平 张 怡 周应胜

● ● ● ● ● ● ● ● ● 前 言 ● ● ● ● ● ● ● ● ●

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 2030 年光伏发电将占世界发电总量的 30% 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制订发展计划，使光伏市场呈现出蓬勃发展的格局。目前，中国已经有各种光伏企业超过 1000 家，中国已成为继日本、欧洲之后的太阳能电池生产大国。2008 年，可以说是中国光伏材料产业里程碑式的一年。由光伏产业热潮催生了上游原料企业的遍地开花。一批新兴光伏企业不断扩产，各地多晶硅、单晶硅项目纷纷上马，使得中国光伏产业呈现出繁华景象。

发展太阳能光伏产业，人才是实现产业可持续发展的关键。硅材料和光伏产业的快速发展与人才培养相对滞后的矛盾，造成了越来越多的硅材料及光伏生产企业人力资源的紧张；人才培养的基础是课程，而教材对支撑课程质量举足轻重。作为新开设的专业，没有现成的配套教材可资借鉴和参考，编委会根据硅技术专业岗位群的需要，依托多家硅材料企业，聘请企业的工程技术专家开发和编写出了硅材料和光伏行业的系列教材。

本系列教材以光伏材料的主产业链为主线，涉及硅材料基础、硅材料的检测、多晶硅的生产、晶体硅的制取、硅片的加工与检测、光伏材料的生产设备、太阳能电池的生产技术、太阳能组件的生产技术等。

本系列教材在编写中，理论知识方面以够用实用为原则，浅显易懂，侧重实践技能的操作。

本书集编者多年来从事直拉单晶硅的工艺研究成果和生产实践中的经验，结合理论基础，用大量的篇幅和现场照片阐述了直拉单晶硅生产工艺的全过程，以崭新的面貌奉献给读者，以期达到培养实用型人才的目的。

本书可作为高职高专太阳能光伏产业硅材料技术专业学生的教材，同时可作为企业对员工的岗位培训教材，也可作为相关专业的工程技术人员参考学习。

本书由黄有志、王丽主编；参加编写的人员还有邓丰、杨岍、唐正林；本书由黄玫、邓永智主审。参加审稿的老师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，本系列教材只是一个起步，在编写过程中难免存在不足之处，恳请社会各界批评指正，编委们将在今后的工作中不断修改和完善。我们相信，本系列教材的出版发行，将促进我国硅材料及光伏事业的进一步发展。

教材编审编委会

2009 年 3 月

目 录

绪论	1
第1章 单晶硅的基本知识	3
1.1 晶体和非晶体	3
1.2 单晶和多晶	7
1.3 空间点阵和晶胞	8
1.4 晶面和晶向	11
1.5 晶体的熔化和凝固	15
1.6 结晶过程的宏观特征	16
1.7 晶核的形成	17
1.8 二维晶核的形成	18
1.9 晶体的长大	19
1.10 生长界面结构模型	21
习题	23
第2章 直拉单晶炉	25
2.1 直拉单晶炉设备简介	25
2.2 直拉单晶炉的结构	26
2.3 机械部分	27
2.4 电气部分	35
2.5 直拉单晶炉的工作环境	40
习题	41
第3章 直拉单晶炉的热系统及热场	43
3.1 热系统	43
3.2 热系统的安装与对中	46
3.3 热场	47
3.4 温度梯度与单晶生长	47
3.5 热场的调整	51
习题	52
第4章 晶体生长控制器	54
4.1 CGC-101A型晶体生长控制器功能简介	54
4.2 CGC-101A型晶体生长控制器的开关状态说明	55
4.3 CGC-101A型晶体生长控制器的键盘操作说明	56
4.4 CGC-101A型晶体生长控制器参数设置及定义	61
4.5 CGC-101A型晶体生长控制器使用说明	64
习题	65
第5章 原辅材料的准备	67
5.1 硅原料	67
5.2 石英坩埚	72

5.3 掺杂剂与母合金	74
5.4 其他材料	75
5.5 原辅材料的腐蚀和清洗	76
5.6 腐蚀原理及安全防护	77
5.7 自动硅料清洗机简介	78
习题	80
第6章 直拉单晶硅生长技术	81
6.1 直拉单晶硅工艺流程	81
6.2 拆炉及装料	82
6.3 抽空及熔料	86
6.4 引晶及放肩	88
6.5 转肩及等径	91
6.6 收尾及停炉	93
6.7 拉速、温校曲线的设定	95
6.8 焙升速度的计算方法	97
6.9 异常情况及处理方法	99
习题	101
第7章 铸锭多晶硅工艺	102
7.1 光伏产业简介	102
7.2 铸锭多晶硅炉的结构	103
7.3 铸锭多晶硅工艺流程	105
7.4 铸锭多晶硅的优缺点	108
习题	109
第8章 掺杂技术	110
8.1 杂质	110
8.2 导电型号	111
8.3 熔硅中的杂质效应	111
8.4 杂质的分凝效应	113
8.5 K_{eff} 与 K_0 的关系	117
8.6 结晶后固相中的杂质分布规律	118
8.7 掺杂	121
习题	125
附录 1 硅的物理化学性质 (300K)	126
附录 2 硅中杂质浓度和电阻率关系	127
附录 3 元素周期表	128
附录 4 立方晶系各晶面 (或晶向) 间的夹角	129
附录 5 无尘室的分级标准	130
参考文献	131

猪

论

1947年美国贝尔实验室发明了半导体点接触晶体管，从而开创了人类的硅文明时代。1958年美国 Texas Instruments 和 Fairchild 公司各自研制发明了半导体集成电路 (IC) 之后，IC 的发展从小规模集成 (SSI) 起步，经过中规模集成 (MSI)，发展到大规模集成 (LSI)、超大规模集成 (VLSI)，现在已进入特大规模集成时代 (ULSI)，电路的线宽越来越细，现在已经做到 50nm 以下。IC 的发明是人类世界的伟大革命，IC 已成为今天信息时代的基础，IC 的发展程度是国家实力的体现。现在全世界的半导体器件中有 95% 以上是用硅材料制成的，其中 85% 的集成电路是用硅材料做成的。

众所周知，从遥控儿童玩具、计算器、手机、电视机、VCD 机到电脑、因特网络、声光设备、检测设备、自动控制生产线，再到人造卫星、火箭飞行、潜艇远航、宇宙飞船；从现代生活、生产、科研、医疗、教育、管理到军事、航天，各行各业，无不和大规模集成电路紧密相连。制作大规模集成电路的基础材料就是——单晶硅。单晶硅被广泛地用来制作电子元件，如：变容二极管、雪崩二极管、开关管、微波晶体管、整流器件、探测器、可控硅、大规模集成电路等。集成电路又可分为线性电路、数字电路、双极电路、微处理器、逻辑电路和记忆电路等类别。

近几年来，随着光伏产业的迅猛发展，单晶硅又被用来制作太阳能电池，呈现出供不应求的局面。太阳能电池板在阳光照射下，光能便立即转化成电能，而且不停地发电，可以连续工作 20 年以上。它发出的直流电可直接供给用电器，还可以储存到蓄电池内，再逆变成 220V/380V 交流电，进而组装成太阳能发电机组，供各种家用电器使用，还可将许多硅电池连接起来，组装成光伏电站向国家电网输电。太阳能光伏电池是国家大力推广的，发展前途光明，没有污染的绿色能源。

高科技的发展，要求电路具有很高的可靠性和稳定性，所以生产近乎完美的高质量单晶硅，是每一个材料厂家、器件厂家的共同愿望。这种单晶硅具有良好的断面电阻率均匀性、高寿命、含碳量少、微缺陷密度小、含氧量可以控制的特点。根据用户的不同需要，还可以生产特殊品种的单晶硅材料。

目前，生产单晶硅的方法主要有直拉法、区熔法、其他方法如基座法、片状生长法、气相生长法、外延法等，都因各自的不足未能被普遍推广。直拉法和区熔法比较，又以直拉法为主要，它的投料量多、生产的单晶直径大，设备自动化程度高，工艺比较简单，生产效率高。直拉法生产的单晶硅，占世界单晶硅总量的70%以上。

直拉法又称为切克劳斯基法，它是在 1917 年由切克劳斯基 (Czochralski) 建立起来的一种晶体生长方法，简称为 CZ 法。CZ 法的特点是在一个直筒型的热系统中，用石墨电阻加热，将装在高纯石英坩埚中的多晶硅熔化，然后将籽晶插入熔体表面进行熔接，同时转动籽晶，再反向转动坩埚，籽晶缓慢向上提升，经过引晶、放大、转肩、等径生长、收尾等过程，一支硅单晶体就生长出来了。

直拉法不可避免地要用到石英坩埚，在熔料及单晶生长过程中，一直处在1400℃

以上的高温下，熔硅和石英坩埚自然要发生化学反应，坩埚中的杂质也就进到单晶中去了，使得单晶硅纯度降低，当拉制电阻率大于 $50\Omega \cdot \text{cm}$ （欧姆·厘米）以上的单晶时，质量较难控制。这是直拉法的局限性。如果将直拉炉加上磁场，会抑制这种化学反应，可以将电阻率提高到 $80\Omega \cdot \text{cm}$ 以上。

为了提高直拉单晶硅的产量，直拉单晶炉的投料量也逐渐增加，目前，国内现有设备的投料量多数在 60kg 以上，直径达到 $\phi 6''$ （“”表示英寸 in, 1in=25.4mm）以上，国外可以生产拉制 $\phi 12''$ 、 $\phi 18''$ 单晶的炉型，对应的装料量达到 300、500kg，自动化程度也越来越高。通过联机实现中央集成控制，一个人可以同时监控 6~10 台单晶炉。为了提高单晶硅的质量，国际上出现了磁场法拉晶工艺、连续加料工艺等生产设备和工艺方法。

因此，了解和掌握单晶硅生产技术和基本理论，对于从事单晶硅生产的工人、技术人员和管理人员是非常必要的。

此外，太阳能电池大量用到铸锭多晶硅，所以，本书对铸锭多晶硅工艺也进行了介绍。



..... 第1章 单晶硅的基本知识

学习 目标

掌握：硅晶体结构、晶面和晶向。

理解：生长界面结构模型。

了解：二维晶核的形成。

1.1 晶体和非晶体

自然界的物质通常以三种状态出现：固体、液体及气体，它们是由原子和分子组成的。组成固体和液体的相邻原子之间，其距离为几个埃（ \AA ）（ $1\text{\AA} = 10^{-8}\text{ cm}$, $1\text{\AA} = 10^{-4}\mu\text{m}$ ），相当于 1cm^3 含有 $10^{22} \sim 10^{23}$ 个原子；气体在常温和一个大气压下， 1cm^3 含有 0.7×10^{19} 个分子，分子间的平均距离为 30\AA 左右。

原子（分子或离子）在三维空间中组成固体时，按同一规律呈规则的排列，这样的物体被称为晶体。自然界中的大多数固体，如大家所熟悉的物质：岩盐、水晶、钻石、明矾、结晶食盐、雪花等都是晶体，如图 1-1，还有铜、铁、铅等金属，锗、硅、砷化镓等半导体材料，石墨、石英等都是晶体物质。甚至有的液体，如“液晶”也属于晶体，不过它的原子只是在二维或一维上具有规则的排列。

有的物质粒子结构是无章的，没有规律性，这样的物体被称为非晶体。非晶体是指组成物质的原子（或分子、离子）在空间不呈有规则、周期性排列的固体。它没有一定规则的外形，如玻璃、松香、石蜡等。它的物理性质在各个方向上是相同的，叫“各向同性”。它没有固定的熔点。

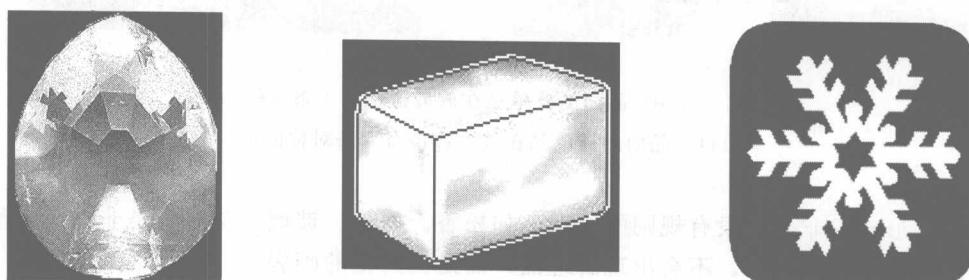


图 1-1 常见的几种晶体：钻石、食盐晶体、雪花晶体

1.1.1 晶体大都有规则的外形

在地球上，天然形成的晶体大都具有规则的外形，在珠宝店里常常看到水晶原矿石，每一个晶粒都是由很多光洁的小平面围成的多面体，很有规则，闪闪发光，它们就是晶体。又如岩盐，外形是正方体，如图 1-2(a) 所示。

人工生长的晶体，晶体外形也能显露出来，如食盐，在含尿素溶液中生长的食盐为八面体，在含硼酸的溶液中生长的为立方体兼八面体，如图 1-2(b) 所示。

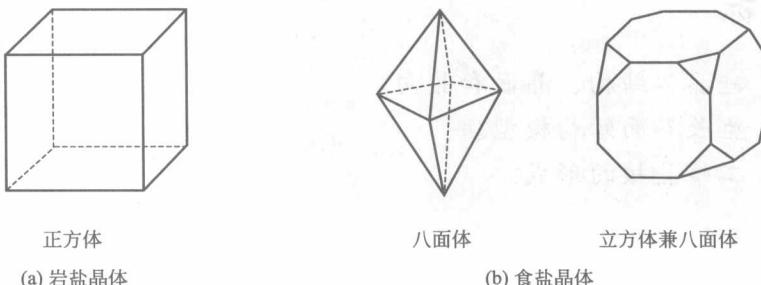


图 1-2 晶体外形

人工生长的直拉硅单晶也是一种晶体，沿 $\langle 111 \rangle$ 方向生长的，有三条或六条对称分布的棱线；沿 $\langle 100 \rangle$ 方向生长的，则有四条对称分布的棱线，如图 1-3 所示。将 $\langle 111 \rangle$ 取向的硅单晶片弄碎，会发现小碎片为正三角形，而 $\langle 100 \rangle$ 取向的小碎片则为矩形。在外力作用下，硅单晶片往往沿着解理面裂开，晶向不同，解理面的方位也不同。

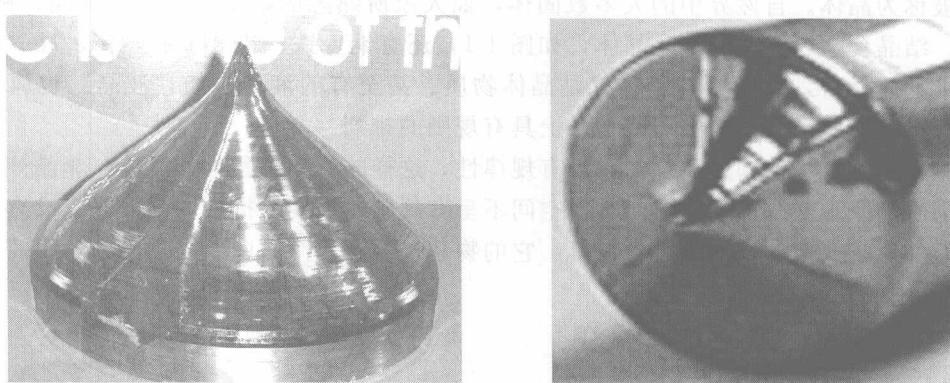


图 1-3 $\langle 100 \rangle$ 晶向的硅单晶在放肩部位有 4 条对称的棱

$\langle 111 \rangle$ 晶向的硅单晶在放肩部位有 6 条对称的棱

天然形成的非晶体没有规则的外形，如松香。石蜡、玻璃、塑料也是非晶体，没有规则的外形。将其打碎，不会出现解理面，而是无规则的碎裂。

由于组成晶体的原子（分子或离子）具有规则的排列这一本质，决定了晶体内部出现若干个晶面，晶体具有规则的外形就是由这些晶面围成的。例外也有，如某些金属、

合金等尽管是晶体，但却没有规则的外形。

1.1.2 晶体具有一定的熔点

将晶体（或非晶体）逐渐加热，每隔一定时间测量一下它们的温度，一直到它们全部熔化（或者成为熔体），可以作出温度和时间关系的曲线—熔化曲线，如图 1-4（或图 1-5）所示。

从晶体的熔化曲线（图 1-4）中可以看到：从 a 点开始，当晶体从外界吸收热量时，其内部分子、原子的平均动能增大，温度也开始升高，但还没有破坏其空间点阵，仍保持有规则的排列，也就是说还维持着固体状态。到达 b 点后，晶体温度保持不变，进入一个温度平台 bc，从 b 点开始，其分子、原子的剧烈运动达到了破坏规则排列的程度，某些空间点阵也开始解体，从固体开始变成液体，晶体的一部分开始熔化，余下的还是固体。无论熔化了已经变成的熔体，或尚未熔化的固体都处在同一个温度值，尽管继续加热，温度却始终保持不变，这个温度就是晶体的熔点。在熔点温度时，固体吸收的热量，用来逐步地破坏晶体的空间点阵，用来将固态转化为液态，所以整个温度并不升高。随着时间推移，液体逐渐增加，固体逐渐减少，直到全部固态熔化成液体为止，即到达 c 点，如果再继续加热，整个液体的温度又继续上升，如 cd 段所示。

同样，可以作出非晶体的熔化曲线，如图 1-5，可以看到，非晶体没有温度平台，随着时间的推移，温度不断升高，bc 段很难说是固态还是液态，而是一种软化状态，

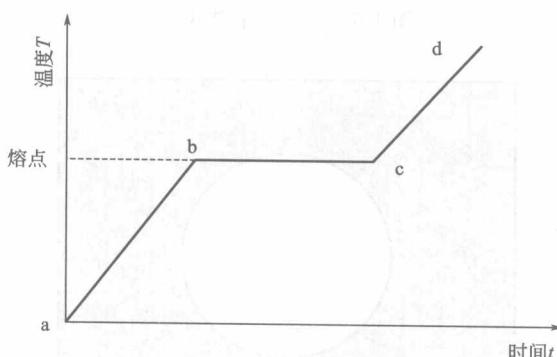


图 1-4 晶体熔化曲线

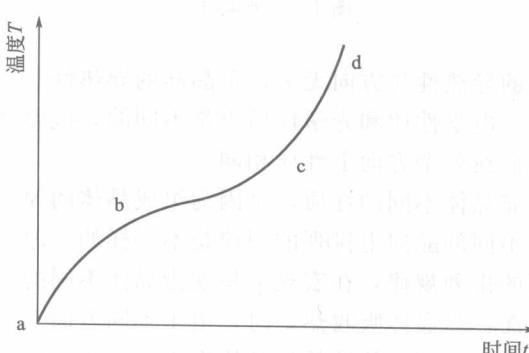


图 1-5 非晶体熔化曲线

不具有流动性，温度继续升高就成为液体。

晶体具有确定的熔点，非晶体没有确定的熔点，这是晶体和非晶体之间最明显的区别。熔点是晶体从固态转变到液态（熔化）的温度，也是从液态转变为固态（凝固）的温度。

1.1.3 晶体的各向异性

晶体的物理性质和化学性质，会随着晶体的晶向不同而有所不同，称为晶体的各向异性。下面做一个实验，在薄的单晶硅片上和玻璃片上都涂上石蜡，分别用一个加热的金属针尖放在硅片和玻璃片上，就会发现，触点周围的石蜡逐渐熔化，玻璃片上的熔蜡形状呈圆形，单晶硅片上的呈圆弧三角形，如图 1-6 和图 1-7 所示。

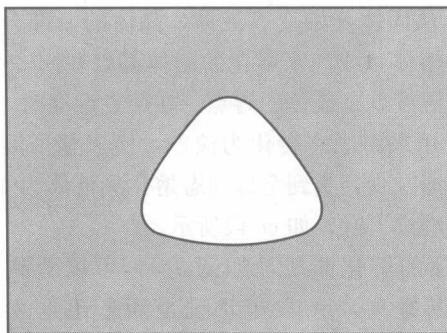


图 1-6 $\langle 111 \rangle$ 单晶硅片

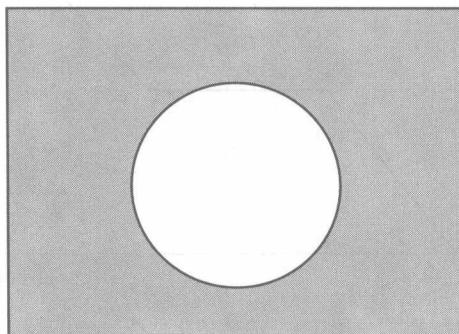


图 1-7 玻璃片

以上实验说明玻璃的导热性与方向无关，单晶硅的导热性与方向有关。晶体在不同的方向上，其力学性质、电学性质和光学性质也是不同的，抗腐蚀、抗氧化的性质也不同。非晶体则不然，它们在各个方向上性质相同。

晶体之所以具有和非晶体不同的性质，是因为组成晶体的原子或分子是按一定规律周期性对称排列的，在不同的晶向上排列的规律是不一样的，原子的空间点阵和疏密程度也是不一样的。不同的排列规律，在宏观上呈现为晶体不同的独特几何形状，呈现出不同的外形和不同的晶面，当晶体吸收热量时，由于不同方向上原子排列疏密不同，间距不同，吸收的热量多少也不同，传输热量的快慢也不一样，表现出不同的传热系数和膨胀系数。所以，在不同的晶向上性质也不相同，呈现出各向异性的特点。

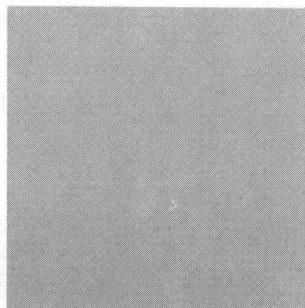
非晶体的内部组成是原子无规则的均匀排列，没有一个方向比另一个方向特殊，如同液体内的分子排列一样，形不成空间点阵，吸收热量后不需要破坏其空间点阵，只用来提高平均动能，所以当从外界吸收热量时，便由硬变软，最后变成液体，故表现为各向同性。玻璃、蜂蜡、松香、沥青、橡胶等就是常见的非晶体。

1.2 单晶和多晶

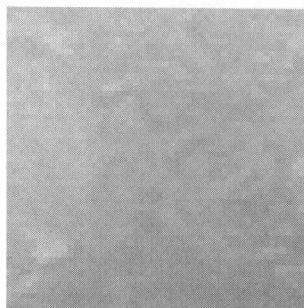
1.2.1 单晶

在晶体中，晶体的各个部分，从上到下，从里到外，所有的原子、分子或离子都是有规则的排列，组成了一个空间点阵。这种排列具有周期性、对称性，它们的结晶学方向都是相同的。根据这种周期性和对称性，总可以找到一个最小的结构单元，而它周围的结构，其实就是将它重复排列的结果，最终组成了整个晶体，这个结构单元称为晶胞，它能体现晶体的基本性质，它是组成晶体的最小单元。也可以理解为，同一种晶胞在三维空间里不断地重复平移（当然必须是按照这种晶体的原子排列规则进行平移），就组成了晶体，这样的晶体称为单晶体，还可以说，该物体的质点按同一取向排列，由一个核心（称为晶核）生长而成的晶体就是单晶体。

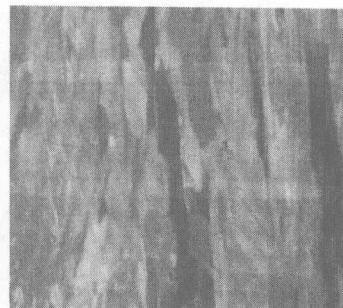
单晶体有大有小，小到一个晶胞、一个晶粒，大到几百千克。之所以将它称为单晶体是因为组成它的物质是相同的，组成它的所有晶胞的晶向是相同的。因此，有的还具有规则的外表面和棱线。



(a) 单晶硅片



(b) 多晶硅片



(c) 多晶硅片

图 1-8 单晶硅片和多晶硅片的区别

1.2.2 多晶

一个物体包含了很多个晶体（晶粒），这些晶体杂乱无章地聚结组合在一起，具有多种晶向，晶体之间的原子排列发生了变异，从而产生了界限，称为晶界。从单独一个晶体看，具有单晶体的性质，但从整个物体看，却没有单晶的性质，各向异性的特征消失，这个物体虽然是晶体，但不具备周期性和对称性，也不具备同一个晶向，这种物体称为多晶体，它是由大量结晶学方向不相同的晶体组成的。

因为多晶中各个晶粒的取向不同。在外力作用下，某些晶粒的滑移面处于有利的位向，当受到较大的切应力时，位错开始滑移。而相邻晶粒处于不利位向，不能开动滑移系时，则变形晶粒中的位错不能越过晶粒晶界，而是塞积在晶界附近，这个晶粒的变形便受到约束。所以，多晶的变形困难一些。单晶的塑性形变相对容易些，在外力作用下，容易沿着解理面剖开。

图 1-8 是单晶硅片和多晶硅片的实物照片，可以清楚地看出多晶硅片上有很多的晶粒，晶粒之间有明显的晶界，由于晶向各不相同，呈现出深浅不同的色差。单晶片色调一致，没有色差。

人工制取单晶过程中，有时发生晶变就可能生成双晶或者多晶。

1.3 空间点阵和晶胞

晶体是由原子、分子或离子等在空间按一定规律排列组成的。这些粒子在空间排列时具有周期性、对称性。同一种物质粒子在空间进行不同的排列，形成的晶体是不一样的，各自具有不同的外形和不同的性质。例如，石墨和金刚石都是碳原子组成的，但石墨为层状结构，黑色，各层之间是范德华力结合，容易滑动，所以石墨很软；金刚石为正方体结构，透明，坚硬。尽管它们都是碳原子组成的，是相同的粒子，但是由于结构不同，它们的性质迥然不同，如图 1-9 和图 1-10 所示。不同物质的粒子，若有相同的

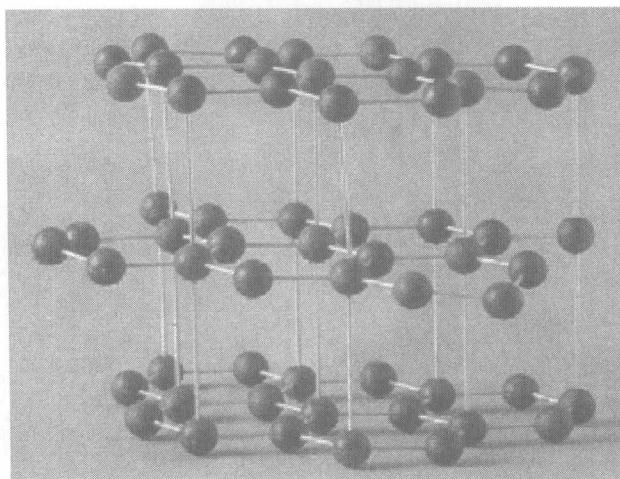


图 1-9 石墨原子排列结构图

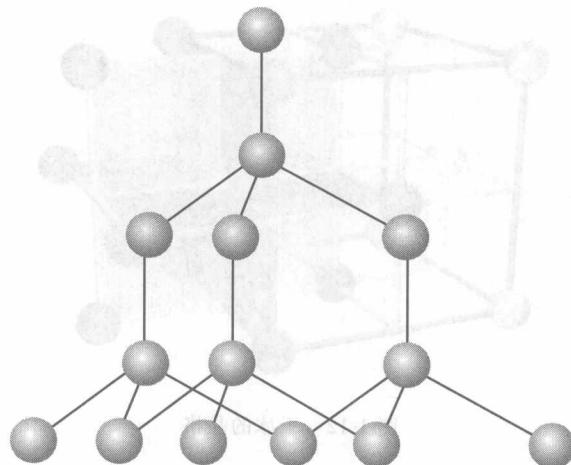


图 1-10 金刚石原子排列结构图

平面的互不平行的直线叫做晶列。图 1-11 所示为一个三棱晶体——金刚石晶胞。

从图中可以看出，晶胞由许多小平面构成，单个平面称为晶面，晶胞由许多晶面围成。

排列，晶体性质也不相同。

把晶体的微观结构放大很多倍，就会看到很多粒子分布在空间，仔细观察研究后发现，它们的这种分布或者排列很有规律，为了研究晶体中的原子、分子或离子的排列，把这些粒子的重心作为一个几何点，叫做格点，粒子的分布规律用格点来表示。晶体中有无限多个格点，它们在空间是按一定规律分布的，这种有规律的格点分布称为空间点阵，如图 1-9~图 1-12 所示。

在空间点阵中，通过两个格点作一条直线，这一直线上一定含有无数格点。格点间的距离总是相等的，称为晶格常数，这样的直线叫晶列。互相平行的晶列叫晶列线，所有互相平行的晶列线称为晶列族，一个晶列族里包含了晶体的全部格点。直拉单晶硅表面的棱线就是晶列的宏观表现。

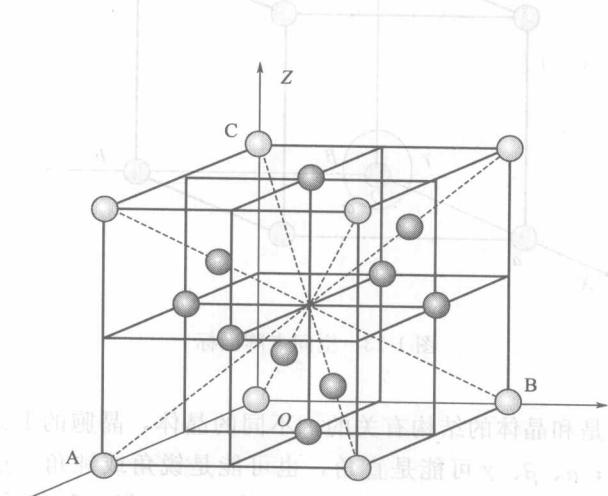


图 1-11 金刚石晶胞

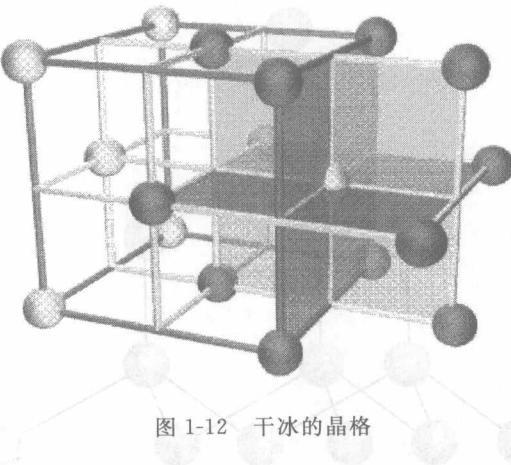


图 1-12 干冰的晶格

通过不在同一晶列的三个格点作一个平面，这平面上必定包含无数格点，这样的平面叫晶面。直拉单晶硅表面的小平面就是晶面的宏观表现。

在空间点阵中，取三个不同的晶列族，它们将空间分为无数个格子，称为晶格，原子（分子或离子）就占据在格点上，如图 1-11 和图 1-12 所示，组成了空间点阵。

点阵的排列往往呈对称形，其对称轴称为晶轴。以一个格点为原点，可以在晶体中选取三个互不平行的晶轴（X 轴、Y 轴、Z 轴）作为坐标系，以晶轴上两个相邻格点间的距离为晶格常数，记为 a 、 b 、 c 。三个轴之间的夹角分别用 α 、 β 、 γ 来表示。这样，研究晶格结构就方便多了，如图 1-13 所示。

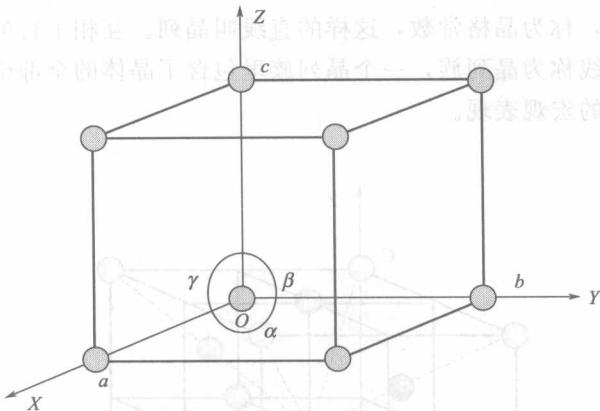


图 1-13 空间点阵坐标

α 、 β 、 γ 三个角是和晶体的结构有关的，不同的晶体，晶胞的形式是不同的，所以 a 、 b 、 c 不一定相等； α 、 β 、 γ 可能是直角，也可能是锐角或钝角。这样又可以分为不同的晶系，如三斜、正交、立方等七种晶系（见表 1-1）。每一种晶系又包含 1~4 种点阵结构，共计 14 种。例如立方晶系包含简单立方、面心立方、体心立方三种点阵结构，如图 1-14 所示。