

晶体线坐标网

潘金生

(清华大学工程物理系)

在许多晶体学工作中,为了确定晶面指数和晶体取向,广泛地采用各种角坐标网,如乌氏网、格氏网、梁氏网等^[1]。但是,用角坐标网来确定晶面指数是一种间接的方法,且比较费事。本文在心射投影的基础上提出了一个新的概念——晶体线坐标网,它是一种直接给出任意晶面极点或劳厄斑点的密勒指数的线网。

一、原理

根据心射投影的定义和倒易点阵的基本性质,某晶面极点的心射投影在倒易点阵中的坐标(倒易坐标)决定该晶面的密勒指数。为了确定心射投影点的倒易坐标,只要过该点作三个平行于倒易坐标面的平面,则此三平面在倒易坐标轴上的截距就给出了该点的倒易坐标[见

图1,图中的心射投影点 S 的倒易坐标为 (S_x, S_y, S_z) 。如果事先按一定的坐标单位作一系列平行于倒易坐标面的平行平面族,则这些平面与心射投影面的交线就构成了直线网络,这就是心射线坐标网。由它即可直接读出任意心射投影点的倒易坐标,约简后即得到相应晶面或参考方向的指数。图2是立方晶系(111)心射线坐标网示意图[投影面为(111)]。图中 P 点的倒易坐标为 $(6, 6, 8)$,相应的晶面指数为 (334) 。

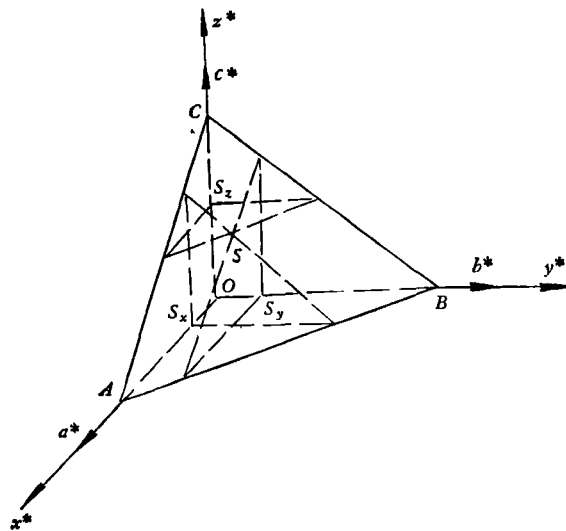


图1 倒易坐标的确定

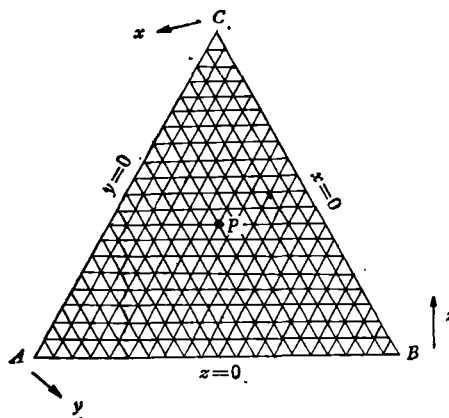


图2 立方晶系(111)心射线坐标网示意图

根据心射投影与极射投影及劳厄斑点(以下称为衍射投影)的几何关系,很容易由心射线坐标网作出极射和衍射线坐标网,分别用于直接读出极射投影点和劳厄斑点(衍射投影点)的密勒指数。

二、基本公式

已知晶体的点阵常数 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$, 心

射投影面 (hkl) , 以及晶体至投影面的距离 D , 求作 (hkl) 心射线坐标网。

这里, 关键是确定坐标线的方向和坐标单位。

1. 坐标线方向

如图 3, 设投影面与三个倒易坐标面分别交于 \overline{AB} , \overline{BC} 和 \overline{CA} (称为坐标基线), 投影中心为 S (OS 垂直于投影面)。过 S 作 \overline{AB} ,

\overline{BC} , \overline{CA} 的垂线, 得到三个坐标轴 Sx , Sy , Sz , 它们的交角便决定了坐标线方向。

从图 3 知

$$\left. \begin{aligned} (\widehat{Sx, Sy}) &= 180^\circ - C, \\ (\widehat{Sy, Sz}) &= 180^\circ - A, \\ (\widehat{Sz, Sx}) &= 180^\circ - B. \end{aligned} \right\} (1)$$

$Sx-Sy-Sz$ 按逆时针旋转顺序。 A, B, C 可由倒易点阵定义和简单的矢量运算求得, 结果为

$$\left. \begin{aligned} \cos A &= \frac{k^*l^*(a^*)^2 - h^*l^*a^* \cdot b^* + (h^*)^2b^* \cdot c^* - h^*k^*c^* \cdot a^*}{\sqrt{[(h^*c^*)^2 + (l^*a^*)^2 - 2l^*h^*c^* \cdot a^*][(k^*a^*)^2 + (h^*b^*)^2 - 2h^*k^*a^* \cdot b^*]}}, \\ \cos B &= \frac{h^*l^*(b^*)^2 - h^*k^*b^* \cdot c^* + (k^*)^2c^* \cdot a^* - k^*l^*a^* \cdot b^*}{\sqrt{[(l^*b^*)^2 + (k^*c^*)^2 - 2k^*l^*b^* \cdot c^*][(k^*a^*)^2 + (h^*b^*)^2 - 2h^*k^*a^* \cdot b^*]}}, \\ \cos C &= \frac{h^*k^*(c^*)^2 - k^*l^*c^* \cdot a^* + (l^*)^2a^* \cdot b^* - h^*l^*b^* \cdot c^*}{\sqrt{[(l^*b^*)^2 + (k^*c^*)^2 - 2k^*l^*b^* \cdot c^*][(h^*c^*)^2 + (l^*a^*)^2 - 2l^*h^*c^* \cdot a^*]}} \end{aligned} \right\} (2)$$

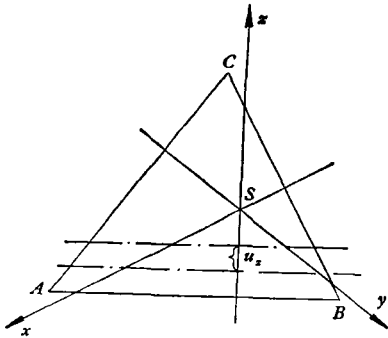


图 3 坐标线方向和单位的确定

式中 a^*, b^*, c^* 是倒易点阵基矢, d_0 是 (hkl) 面的晶面距 [在按 (3) 式计算 h^*, k^*, l^* 时, d_0 可以略去]。

2. 坐标单位

由于 \overline{AB} 上各点的倒易坐标 $z = 0$, 而在 C 点 $z = 1/l^*$, 故从 \overline{AB} 到 C 点之间可作 $(1/l^*)$ 条坐标线。同样, 从 \overline{BC} 到 A 点可作 $(1/h^*)$ 条坐标线, 从 \overline{CA} 到 B 点可作 $(1/k^*)$ 条坐标线。由此可以求出相邻坐标线间的距离。在实际作图中, 还要考虑放大倍数 $M = D / (\frac{1}{d_0}) =$

式中 h^*, k^*, l^* 是 (hkl) 面在倒易点阵中的晶面指数。通过矢量运算可以求得

$$\left. \begin{aligned} h^* &= d_0^2 [h(a^*)^2 + k a^* \cdot b^* + l c^* \cdot a^*], \\ k^* &= d_0^2 [h a^* \cdot b^* + k(b^*)^2 + l b^* \cdot c^*], \\ l^* &= d_0^2 [h a^* \cdot c^* + k b^* \cdot c^* + l(c^*)^2], \end{aligned} \right\} (3)$$

Dd_0 , 同时从精度考虑还可将各间距细分为 n_x, n_y, n_z 等分 (n_x, n_y, n_z 为任选的适当整数), 于是最后得到的坐标单位为

$$\left. \begin{aligned} u_x &= \frac{Dd_0 \sin C}{n_x} \sqrt{\left(\frac{h^*c^*}{l^*}\right)^2 + (a^*)^2 - 2\left(\frac{h^*}{l^*}\right) c^* \cdot a^*} \\ &= \frac{Dd_0 \sin B}{n_x} \sqrt{(a^*)^2 + \left(\frac{h^*b^*}{k^*}\right)^2 - 2\left(\frac{h^*}{k^*}\right) a^* \cdot b^*}, \\ u_y &= \frac{Dd_0 \sin A}{n_y} \sqrt{\left(\frac{k^*a^*}{h^*}\right)^2 + (b^*)^2 - 2\left(\frac{k^*}{h^*}\right) a^* \cdot b^*} \\ &= \frac{Dd_0 \sin C}{n_y} \sqrt{(b^*)^2 + \left(\frac{k^*c^*}{l^*}\right)^2 - 2\left(\frac{k^*}{l^*}\right) b^* \cdot c^*}, \end{aligned} \right\} (4)$$

$$u_z = \frac{Dd_0 \sin B}{n_z} \sqrt{\left(\frac{l^*b^*}{k^*}\right)^2 + (c^*)^2 - 2\left(\frac{l^*}{k^*}\right)b^* \cdot c^*}$$

$$= \frac{Dd_0 \sin A}{n_z} \sqrt{(c^*)^2 + \left(\frac{l^*a^*}{h^*}\right)^2 - 2\left(\frac{l^*}{h^*}\right)c^* \cdot a^*}$$

采用上述坐标单位后,任意晶面的密勒指数 (h, k, l) 和它的心射投影点坐标 (x_i, y_i, z_i) 的关系为

$$\left. \begin{aligned} x_i &= \frac{n_x h_i}{d_0^2 E}, \\ y_i &= \frac{n_y k_i}{d_0^2 E}, \\ z_i &= \frac{n_z l_i}{d_0^2 E}, \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

式中 $E = h^2(a^*)^2 + k^2(b^*)^2 + l^2(c^*)^2 + (h_1k + hk_1)a^* \cdot b^* + (k_1l + kl_1)b^* \cdot c^*$

$$+ (l_1h + lh_1)c^* \cdot a^*.$$

对投影中心, $d_0^2 E = 1$, 故 (hkl) 线坐标网中心的坐标为

$$x_0 = n_x h, \quad y_0 = n_y k, \quad z_0 = n_z l. \quad (6)$$

由(5)式可见,若选取 $n_x = n_y = n_z$, 则

$$x_i : y_i : z_i = h_i : k_i : l_i.$$

以上各式就是绘制任意晶系任意 (hkl) 线坐标网的全部公式。当晶体对称度较高时,公式可以大大简化。

在许多情形下 X 射线(或电子束)入射方向

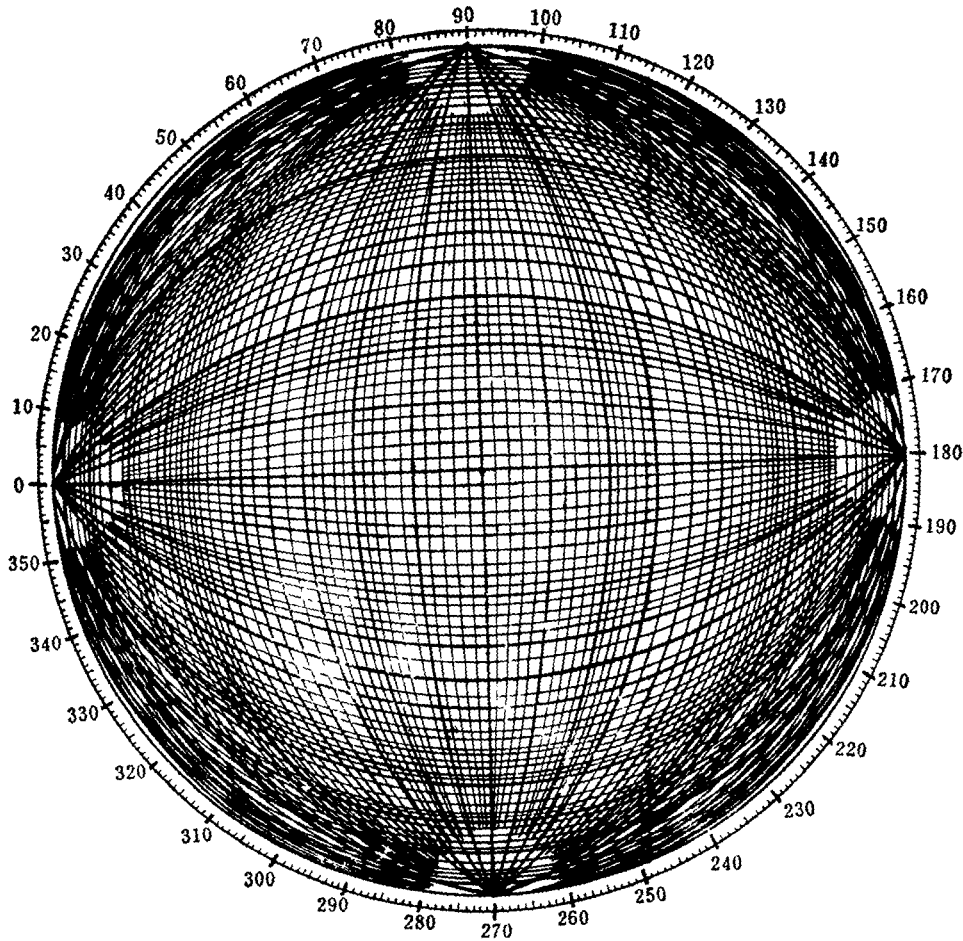


图4 立方晶系(001)极射投影线坐标网

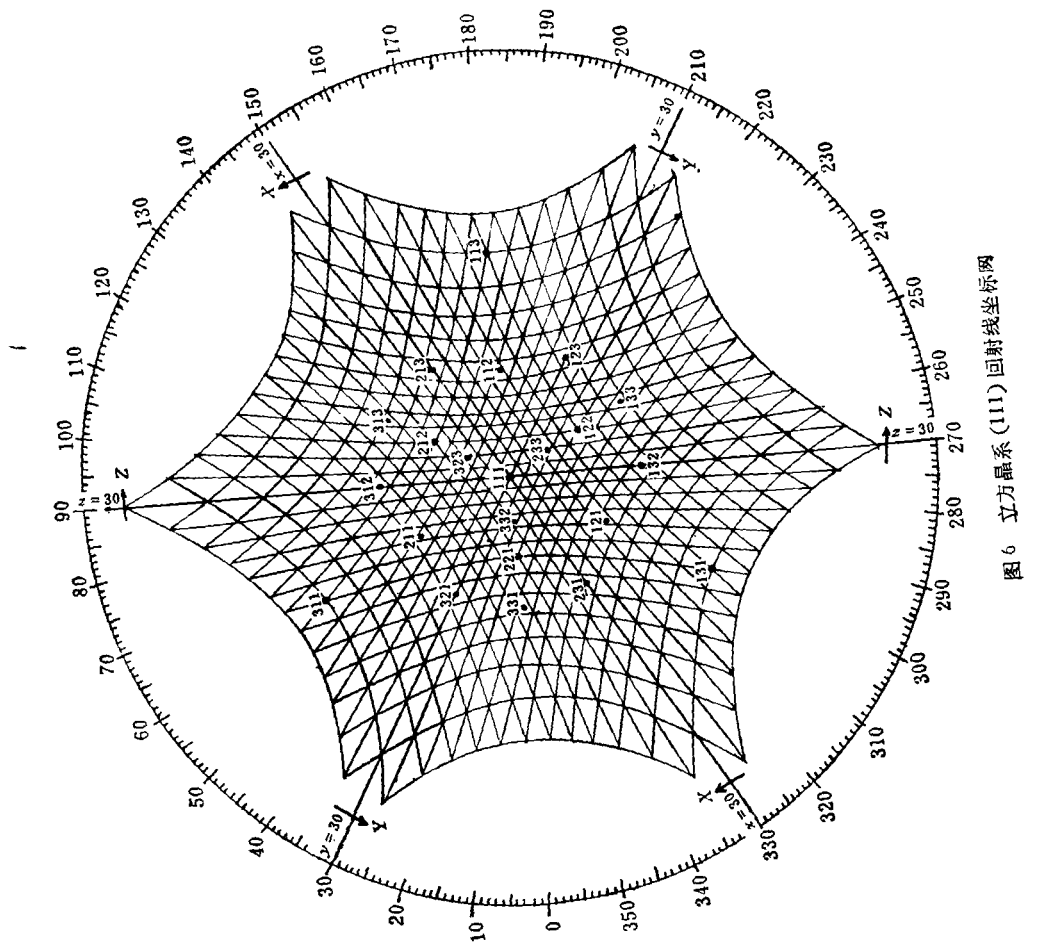


图6 立方晶系(111)回射线坐标网

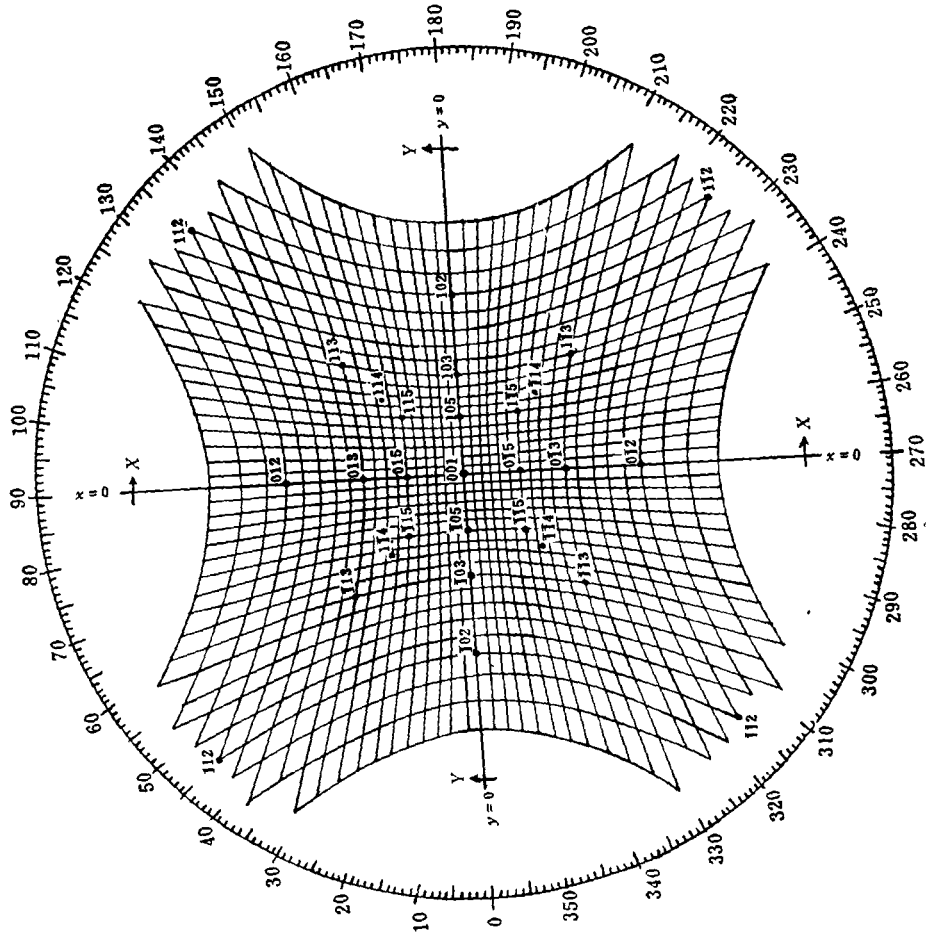


图5 立方晶系(001)回射线坐标网

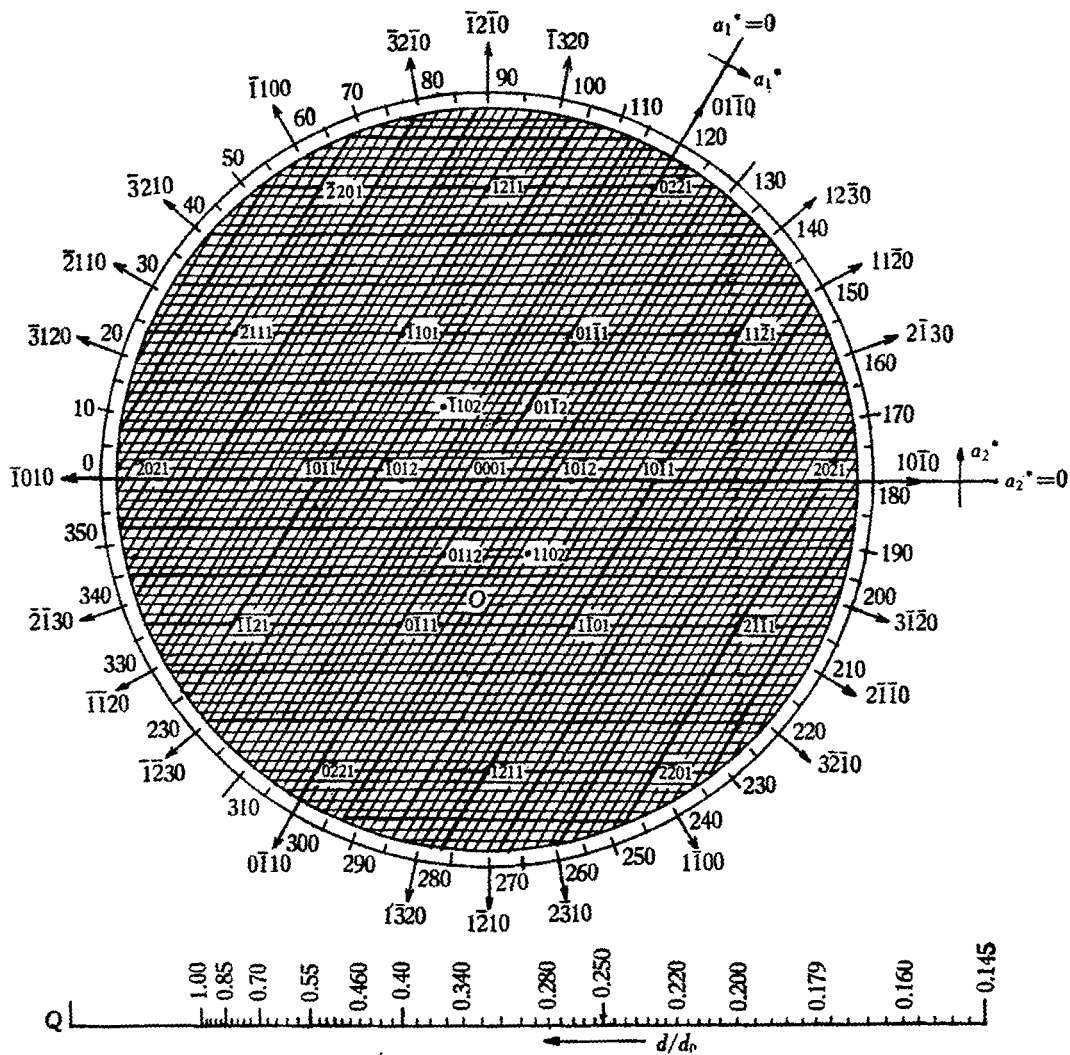


图7 石英晶体(0001)心射线坐标网

[uvw] 是已知的, 此时便需绘制 [uvw] 线坐标网。为此可令

$$\left. \begin{aligned} h^* &= u, \quad k^* = v, \quad l^* = w, \\ h &= \frac{u(\mathbf{a} \cdot \mathbf{a})^2 + v(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) + w(\mathbf{c} \cdot \mathbf{a})}{u(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) + v(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) + w(\mathbf{c})^2}, \\ k &= \frac{u(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) + v(\mathbf{b})^2 + w(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})}{u(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) + v(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) + w(\mathbf{c})^2}, \\ l &= 1. \end{aligned} \right\} (7)$$

其它公式和计算 (hkl) 线网一样。

根据以上公式, 我们绘制了立方晶系(001)极射线网和一套标准心射及回射线网, 石英晶体的(0001)心射和回射线网。图4至图7是若干实例, 各图中 $D = 3\text{cm}$ 。

在图4中, 各点 $z = 30$, x, y 坐标按表1读出:

表 1

坐标范围	0—30	30—100	100—150
分格读数	2	5	10
坐标范围	150—300	300—600	600—1000
分格读数	30	100	200

在图5中 $z = 30$, x 和 y 的分格坐标都是 1。

在图6中 x, y, z 的分格坐标都是 2。

在图7中, $z = 30$, x 和 y 的分格坐标都是

是 2.

三、应 用

线坐标网的主要应用如下:

1. 转换投影

利用立方晶系(001)线坐标网很容易将任意晶系的极射、心射和衍射投影相互转换。例如,将劳厄斑点转换成极射或心射投影等,其操作比现有方法更简便。

2. 直接读出劳厄斑点指数和单晶体取向

当 X 光入射方向沿已知的 $[uvw]$ 方向时,只要将劳厄照片叠在相应的 $[uvw]$ 衍射线网上,就可直接读出全部劳厄斑点指数。为了读出和照片平行的任意参考方向(如试样轴)的方向指数,只要读出该方向上任意两点的坐标,则相应坐标的差化简后就是方向指数。这显然比通常采用的极射投影^[1]或心射投影^[2,3]方法简便得多。我们用这种直接读数法标注了已知入射方向的尖晶石、石英和铝单晶的透射及回射劳厄照片,都得到了满意的结果。

当 X 光入射方向未知,但按晶体外形可以肯定它是一个主要晶向时,上述方法也完全适用。

当 X 光入射方向完全任意时,仍可用衍射线网直接标注照片,但不如上面那样简便。具体方法有三种:(1)通过格氏网或梁氏网转动衍射斑点,以得到标准劳厄照片,然后和一套标准衍射线网逐一对照。(2)根据第一张照片,将试样转动一定的角度,然后拍摄第二张照片,这时入射方向是某个主要晶向,因而可以直接标注。(3)预先绘制各种入射方向的衍射线网,并用它和未知照片逐一对照。这实际是文献[4]提出的方法的进一步发展。

值得指出,由于目前已在荧光屏上直接显示劳厄斑点,因而衍射线网的应用前景可能更大。例如,有可能在荧光屏上直接读出斑点指数和晶体取向,而不必拍摄劳厄照片。

3. 快速绘制任意晶系的标准投影

利用立方晶系的标准线坐标网可以很方便地绘制任意晶系的标准投影。这是因为任意晶系的 (hkl) 极点都可换算成立方晶系中坐标为 (x, y, z) 的点。例如,单斜晶系(001)标准投影中的 (hkl) 点对应着立方晶系(001)线坐标网中的 (x, y) 点,而

$$\left. \begin{aligned} x &= D \left(\frac{h}{l} \right) \left(\frac{c}{a} \right), \\ y &= \frac{Dc}{la \sin r} \left[k \left(\frac{a}{b} \right) - h \cos r \right]. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

由(8)式不难求得六方、正交、四方和立方晶系的(001)标准投影计算公式。由于计算简单,又省去了作图操作,这种方法显然比目前通用的方法简便得多。我们用这种方法绘制了 α -Zr, Zn, α -U 等金属的(001)标准投影,结果很好。

4. 确定晶面间距

心射线坐标网的一个独特用处是可以确定任意晶面的晶面间距。例如,为了求得石英晶体(02 $\bar{2}$ 1)面的晶面距,可将描图纸叠在石英晶体(0001)心射线网上(见图7),记下(02 $\bar{2}$ 1)点的位置 P_g ;再将描图纸绕中心 S 旋转,使 P_g 位于水平轴上,记下此时心射线网上 O 点的位置($\overline{SO} = D$);然后将描图纸移到图下方的 (d/d_0) 标尺上(本图中 $d_0 = c$),使 O 点和标尺端点 Q 重合,则 P_g 点的坐标就是所求的 (d/d_0) 。我们用这种方法求得石英晶体(02 $\bar{2}$ 1)面的晶面距为 $d = 0.365c$,而按晶面距公式计算的数值为 $0.366c$,误差只有 0.27% (原则上讲,只要心射线网的比例尺足够大,误差就可以足够小)。

5. 标定电子衍射谱

目前标定电子衍射谱的方法都是基于它和倒易点阵截面的类似性,用对照现成的图表的办法定出各衍射斑点指数^[5]。既然心射线网也和倒易点阵截面类似,我们就可以用它来直接

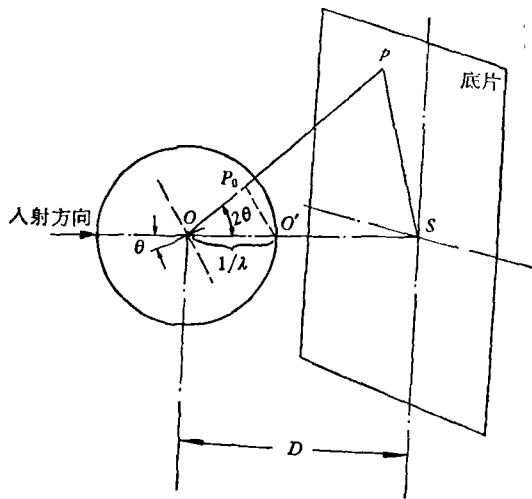


图8 电子衍射原理

标定电子衍射谱。

假定电子波平行于 $[uvw]$ 方向入射(见图8), 晶体位于半径为 $1/\lambda$ 的反射球中心 O (λ 是电子波波长), 底片至晶体的距离为 D , 并和人射线垂直(中心为 S 点)。如图8, 设倒易点阵原点在 O' , 则位于反射球上的倒易结点 P_0 将产生衍射斑点 p 。现求 P_0 点的倒易坐标 (nh, nk, nl) 与 p 点的心射坐标 (x, y, z) 的关系。

由于布拉格角很小(通常 $\theta < 3^\circ$), 故可近似认为 $O'P_0 \parallel Sp$, 因而 Sp 在心射投影坐标系(坐标原点在晶体中心 O) 中的方向数就决定了衍射面指数 $(nhnknl)$ 。 Sp 的方向数由下式给出

$$Sp = Op - OS = (x - x_0)a^* + (y - y_0)b^* + (z - z_0)c^*$$

式中 (x_0, y_0, z_0) 是 $[uvw]$ 心射线网中心的坐标。只要将 $(x - x_0)$, $(y - y_0)$ 及 $(z - z_0)$ 约简为互质整数, 即得 h, k 和 l 。至于 n 值可由图8所示的几何关系得到, 即

$$n \approx \frac{dR}{D\lambda}, \quad (9)$$

式中 d 是 (hkl) 面的晶面距, $D\lambda$ 是仪器常数。

因此, 如果预先画好 $[uvw]$ 心射线网, 并在网上标出低指数的方向线(通过投影中心的直线, 见图9), 那么标定电子衍射谱时只要将照片叠在心射线网上, 使各列主要斑点位于低

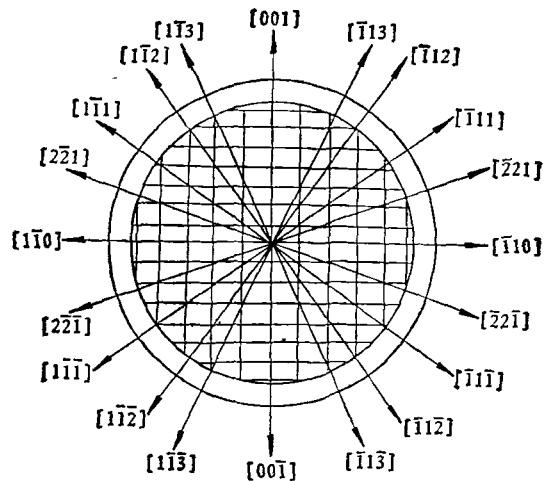


图9 立方晶系 $[110]$ 心射投影 ($D = 3\text{cm}$)

指数的方向线上, 则方向线的指数就是 (hkl) 。对于已知晶体, n 值往往可由消光条件判定, 不一定要按(9)式计算(最多校核一、两个点)。

和现行标定方法相比, 用心射线网标定电子衍射谱有以下几点优点: (1) 简便; (2) 可以定出任意斑点的具体指数; (3) 可以定出任意平行于底片的参考方向指数; (4) 对立方晶系, 一套心射线网适用于各种立方晶体和任意的仪器常数; (5) 心射线网都是由直线组成, 易于绘制。在这种线网上不必标出任何晶面, 只要标出方向线。为了标出 $[u'v'w']$ 方向线, 可以任给一适当的 x 值, 按 $y = y_0 + \frac{v'}{u'}(x - x_0)$ 计算 y [若 $u' = 0$, 则任给一 y 值, 而 $x = x_0 + \frac{u'}{v'}$

$(y - y_0)$], 于是连接投影中心 (x_0, y_0, z_0) 和 (x, y, z) 点的直线就是 $[u'v'w']$ 方向线。

当然也可以利用心射线网预先作出相应的 (uvw) 倒易截面图, 用于直接读出斑点指数。

我们利用立方晶系的 $[110]$ 心射线网成功地标定了有序 CuAu 合金的电子衍射谱, 包括超结构斑点和给定的参考方向, 并求得了比较准确的点阵常数。

6. 其它应用

由于心射线网直接给出了倒易点阵截面, 故可扩大 EWALD 作图的应用范围, 用来确定任意入射方向的单色 X 光被晶体衍射的条件。

此外,将线坐标网和角坐标网结合应用,可以更好地解决许多晶体学问题,如确定参考面(滑移面、孪生面、惯析面等)和参考方向(试样轴、晶带轴等)的密勒指数。

参 考 文 献

[1] 许顺生,金属X射线学,上海科学技术出版社,(1962)。

- [2] C. Palache, *The Amer. Min.*, 5-6—11 (1920).
[3] K. Lonsdals, *Acta Cryst.*, 1 (1948), 548—553.
[4] M. Majima and S. Togino, *Inst. Physical and Chemical Res. Sci. Papers*, 7 (1927), 111, 126.
[5] K. W. Andrews, D. J. Dyson, S. R. Keown, *Interpretation of Electron Diffraction Patterns*, (1971).

金 属 中 的 离 子 注 入

张 国 良

(北京师范大学低能核物理研究所)

一、前 言

离子注入工艺是把要注入的杂质元素电离成离子,然后通过磁分析器分析和加速器加速,得到较纯的离子,并以很快的速度,将这种离子打入固体靶内,以达到改变固体表面的物理化学性能。这种注入工艺早在五十年代就已进行了大量的研究。当时的研究以金属为主,主要是进行原子相互作用的物理探索,模拟反应堆材料的辐照损伤效应。在六十年代初,人们已经知道半导体材料的电学性质,可以由辐照损伤和射入快速离子而产生变化。掺杂的杂质质量只要 10^{-5} at%, 就能使半导体的电学性质发生显著的改变。这样小的掺杂量,对于离子注入工艺是极为方便和有利的。七十年代离子注入工艺又在 MOS 晶体管阈值电压控制中,表现出非常有效的结果,大大促进了离子注入工艺的应用。今天,在半导体工业中,离子注入工艺已经广泛应用。近几年随着半导体方面离子注入研究的发展,对金属材料的离子注入研究又再次在美国、日本和西欧各国盛行起来了。用离子注入改善金属表面的耐腐蚀性能、表面硬化、磨损以及研究表面的形态和相变的研究成果相继发表。1978年九月在匈牙利召开的国际离子

注入材料改性会议上,发表金属方面离子注入研究的文章就有 28 篇,仅次于半导体方面的文章,跃居第二位。英国在工业应用方面取得了可喜的进展,用氮离子注入制造了耐磨损的刀具、模具、冲头等工具,使用寿命有了显著地延长。

二、离子注入金属的特点 及其物理过程的概述

离子注入金属和注入半导体一样,首先把注入的原子电离成离子,然后使带电离子在强电场下加速。通常为了提高注入离子的纯度,还在离子行进的路径上,加一个磁分析器,使离子发生偏转。(按照洛伦兹关系,在一定的磁场强度下,只有特定荷质比的带电粒子,才能按一定的半径偏转。磁铁的半径是已经选定的,所以改变磁场强度,就可以选出一定质量的粒子通过磁分析器。)偏转后的离子就比较纯了,把它引入真空靶室,轰击固体靶。所以,一个通常的离子注入机,主要有离子源、加速管、磁分析器和靶室四部分组成。

高速运动的离子打入金属靶后,就在金属晶体中运动,不断地与金属原子发生碰撞,逐渐地消失能量,最后停止在金属晶体内。离子从