

例 1.1 求晶体中的原子体密度。

考虑一种体心立方单晶材料,如图 1.5(b) 所示,其晶格常数为 $a = 5 \text{ \AA} = 5 \times 10^{-8} \text{ cm}$ 。顶角原子被 8 个聚在一起的晶胞共有,因此每个顶角原子为每个晶胞贡献 $1/8$ 个原子。则 8 个顶角原子共为每个晶胞提供一个等效原子。如果把体心原子也加上,那么每个晶胞共有两个等效原子。

■ 解

每个晶胞所含原子个数为 $\frac{1}{8} \times 8 + 1 = 2$

原子体密度的计算如下:

$$\text{体密度} = \frac{\text{每晶胞的原子数}}{\text{每晶胞的体积}}$$

因此:

$$\text{体密度} = \frac{2}{a^3} = \frac{2}{(5 \times 10^{-8})^3} = 1.6 \times 10^{22} \text{ 个原子/cm}^3$$

■ 自测题

E1.1 面心立方结构的晶格常数是 $4.25 \text{ \AA}$, 确定 (a) 每个晶胞的有效原子数; (b) 确定其原子体密度。

答案: (a) 4; (b) $5.21 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 。

1.3.3 晶面和米勒指数

由于实际晶体并非无限大, 因此它们最终会终止于某一表面。半导体器件制作在表面上或近表面处, 因此表面属性可能影响器件特性。我们可以用晶格来描述这些表面。表面, 或通过晶体的平面, 首先可以用描述晶格的 $\bar{a}$, $\bar{b}$, $\bar{c}$ 轴的平面截距来表达。

例 1.2 描述图 1.6 所示的平面(图 1.6 中只标出了 $\bar{a}$, $\bar{b}$, $\bar{c}$ 轴上的格点)。

■ 解

由式(1.1), 平面截距分别为 $p=3$, $q=2$, $s=1$ 。现在写出它们的倒数, 即

$$\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1}\right)$$

乘以最小公分母, 这里是 6, 得到 (2, 3, 6)。图 1.6 所示平面可以用 (236) 平面标记。这些整数称为米勒指数。我们可以称某个平面为 (hkl) 平面。

■ 说明

凡是与图 1.6 所示平面平行的平面都有相同的米勒指数。任何平行平面都是彼此等效的。

■ 自测题

E1.2 描述图 1.7 所示的平面。

答案: (211) 平面。

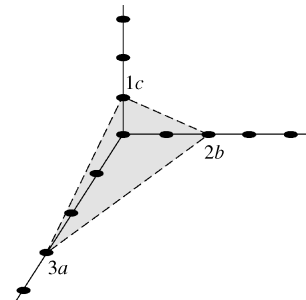


图 1.6 一个典型的晶格平面

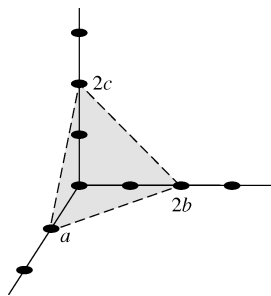


图 1.7 自测题 E1.2 图