



普通高等教育“十一五”国家级规划教材

JIEJINGXUE YU KUANGWUXUE

# 结晶学与矿物学



● 李胜荣 主编

地质出版社



地球科学论坛

bbs.geokx.com



普通高等教育“十一五”国家级规划教材

# 结晶学与矿物学

李胜荣 许 虹 申俊峰 李国武 等编著

地质出版社  
· 北 京 ·

## 内 容 提 要

本书是在中国地质大学潘兆橹教授1993年主编的普通高等教育地质矿产类规划教材《结晶学及矿物学》基础上,结合当前国内外本学科发展的现状和教学改革的需要编写而成的。本书在重视基础理论、基础知识和基本技能及教材系统性的前提下,尽可能地反映了现代矿物学向地球深部和宇宙空间拓展的前沿成果,突出表现了矿物晶体化学特别是晶体结构对矿物晶体属性的约束,并通过“概要”、“思考题”、“矿物加工利用技术”和“附录”为读者提供了掌握主干内容和扩展知识的便捷途径,是一套既适合课堂教学又可供科研参考的创新性明显的教科书。

### 图书在版编目(CIP)数据

结晶学与矿物学/李胜荣主编. —北京:地质出版社,  
2008.5

ISBN 978-7-116-05679-4

I. 结… II. 李… III. ①结晶学-高等学校-教材②矿物学-高等学校-教材 IV. 07 P57

中国版本图书馆CIP数据核字(2008)第059656号

---

责任编辑:王璞 陈磊

责任校对:田建茹 郑淑艳

出版发行:地质出版社

社址邮编:北京海淀区学院路31号,100083

电 话:(010) 82324508(邮购部);(010) 82324572(编辑室)

网 址:<http://www.gph.com.cn>

电子邮箱:zbs@gph.com.cn

传 真:(010) 82310759

印 刷:北京地质印刷厂

开 本:787 mm × 1092 mm <sup>1</sup>/<sub>16</sub>

印 张:22.5

字 数:617千字

印 数:1—5000册

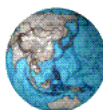
版 次:2008年5月北京第1版·第1次印刷

定 价:31.80元

书 号:ISBN 978-7-116-05679-4

---

(如对本书有建议或意见,敬请致电本社;如本书有印装问题,本社负责调换)



地球科學論壇

bbs.geokx.com

# 前 言

长期以来,中国地质大学和其他许多含地质学类专业院系的“结晶学与矿物学”课程均以潘兆橐教授1993年主编的《结晶学及矿物学》(上、下册)(第三版)为教材。该教材出版以来,不但在教学中发挥了重要作用,而且也成为地学研究的主要参考书,得到有关教学单位和使用者的普遍好评。

近年来,考虑到教学改革的实际需要和学科发展的实际情况,我们在“结晶学与矿物学”课程教学中进行了一系列改革,已取得明显成效,为修编《结晶学及矿物学》教材奠定了基础。

国内现行的矿物学教材有两类,一类适用于150学时左右,以潘兆橐教授1993年主编的《结晶学及矿物学》为代表;另一类适用于60学时左右,以戈定夷教授等1989年编著的《矿物学简明教程》为代表。两类教材的基本体系无明显差异,是我国长期以来所熟悉的体系框架。1998年,罗谷风教授主编了《基础结晶学与矿物学》,在结晶学部分使纵横双向的逻辑关系有机结合起来,形成了很有特色的新体系;在矿物学部分,对矿物描述做了大幅度精简。

国外的相关教材或教学参考书颇多。西方具代表性的教材《Manual of Mineralogy》1993年已出了第21版。近几年又有几部新教材问世,如W. D. Nesse的《Introduction to Mineralogy》(2000)。总体来看,俄罗斯与我国的教材体系较接近,西方国家的教材体系较复杂,有些包括了光性矿物学、X射线晶体学、晶体光学甚至岩石学和岩矿物理化学等内容,涉及面宽,深度也较大。

仅就结晶学与矿物学的内容而言,国内外的各类教材,除硅酸盐外,在矿物分类上多没有据结构型进行亚类划分。Zoltai和Stout编写的《Mineralogy, Concepts and Principles》(1984)以结构为基础对硫化物和氧化物做了进一步分类,但过分强调了它们结构上的配位特点而忽略了许多矿物在强键分布上反映出来的骨架特征,因而不能很好地反映其外在属性的内因。

我们认为,1966年A. C. Поваренных的俄文版《矿物的晶体化学分类》和我国王濮、潘兆橐、翁玲宝等教授编著的《系统矿物学》所使用的矿物亚类划分对解释矿物形态物性十分方便,将该亚类划分原则和部分方案引入教材中是适宜的(本书对少数矿物的分类位置进行了局部调整)。

本教材作为潘兆橐教授主编的《结晶学及矿物学》的修编版,不但要体现长期以来贯穿在我国教学实践中重视“三基”(即基本理论、基本知识、基本技能)的思想,还要能体现当前教学改革的新要求,尽可能全面地反映现代矿物学发展的新趋势,使之既适合课堂教学又能供科研参考。因此,本教材主要具有以下特色:

- 1) 充分考虑地球生物学和生命矿物学发展的新趋势,增加了与生命活动密切相

关的“有机矿物大类”；将氮化物、碳化物、硅化物等矿物从“自然元素大类”中剥离出来，增设了“互化物矿物大类”，以便突出这些矿物在地幔物质和宇宙其他天体物质研究中的突出地位，反映现代矿物学向地球深部和宇宙空间拓展的前缘成果。

2) 以基本结构型(分子型、岛状、环状、链状、层状、架状、配位型)及强键分布为依据，对包括自然元素、硫化物、氧化物、杂盐和卤化物等各类矿物进行亚类划分，体现晶体结构对矿物内外属性的约束，使学生能更好地理解矿物生长特征和不同性质的内部机制。

3) 按照目前多数学校分配给本课程的学时数，既考虑教材内容的系统性又充分考虑各有关专业本科生应掌握的程度，通过各章“概要”，突出基础知识和基本理论，以便于学生掌握课程主干内容。

4) 将矿物的加工利用技术单独分章，使分散在各个矿物中的用途方面的知识通过本章串联起来，形成一个比较完整的矿物加工利用方面的知识系统。

5) 每章后附一定数量导向性的思考题及习题，并配套编写《结晶学与矿物学学习与自学指导书》(另册)，一方面方便学生自学，另一方面也希望学生藉此养成研究性学习的习惯，激发学习的积极性。

6) 本书的绝大部分晶体结构图系按照原子坐标进行绘制，同时重点突出了有关矿物结构型的展示，以便于学生掌握相关矿物结构的基本框架。

7) 为适应“双语”教学的需要，对本学科专业术语进行英文标注，同时增附了大量国内外有关网站和常见矿物符号的简介，以帮助学生尽快进入本专业的国际交流平台。

本书各章节分工如下：前言、第十章、第十四章第二节、第十五章、第十七章、第十八章、第二十章、第二十一章、第二十二章由李胜荣编写；第一章、第二章、第三章由王吉中编写；第四章、第五章、第六章由许虹编写；第七章、第十一章、第十二章、第十三章、第十四章第一节由申俊峰编写；第八章、第九章、第十六章、第二十四章及附录由李国武编写(其中第二十四章第六节由周肃编写)；第十九章由栾文楼编写；第二十三章由袁万明编写；第二十五章由白志民编写。本书图件由张秀宝、李国武、许虹、申俊峰编绘，其中晶体结构图由李国武按照原子坐标精绘。全书由李胜荣修订定稿。

本书是在潘兆橹教授和王濮教授指导下完成的。编写过程中，王文魁教授、孙岱生教授、邵洁莲教授和张汉凯教授提出了许多很好的建议并审阅了部分文稿。籍本书峻笔之际，谨向所有关心本书的师长、领导和同行致以衷心的感谢！同时欢迎为本书修编提出建议和意见。

编 者

E-mail: [lizr@cugb.edu.cn](mailto:lizr@cugb.edu.cn)

2008年3月

# 目次

## 前 言

## 第一篇 结晶学基础

第一章 晶体与晶体的基本性质 .....	(1)
第一节 结晶学研究对象及其科学地位 .....	(1)
第二节 晶体、非晶质体与准晶体的概念 .....	(2)
第三节 空间格子 .....	(4)
第四节 晶体的基本性质 .....	(6)
第二章 晶体生长模型与面角守恒定律 .....	(9)
第一节 晶体生长的途径 .....	(9)
第二节 晶体的层生长与螺旋生长 .....	(10)
第三节 晶面发育的布拉维法则和周期键链理论 .....	(12)
第四节 影响晶体生长的外部因素 .....	(14)
第五节 晶簇与几何淘汰律 .....	(16)
第六节 歪晶与面角守恒定律 .....	(16)
第三章 晶体的测量与投影 .....	(18)
第一节 晶体测角 .....	(18)
第二节 晶体的球面坐标与球面投影 .....	(20)
第三节 晶体的极射赤平投影 .....	(21)
第四节 极式极射赤平投影网 .....	(22)
第五节 吴尔夫网 .....	(23)
第四章 晶体的外部对称 .....	(27)
第一节 晶体对称的概念与特点 .....	(27)
第二节 晶体外部对称要素与对称定律 .....	(28)
第三节 对称要素的组合定理 .....	(32)
第四节 对称型 .....	(33)
第五节 晶体的对称分类 .....	(37)
第五章 晶体定向与晶体符号 .....	(40)
第一节 晶体坐标系的选择 .....	(40)
第二节 晶胞参数与晶体常数 .....	(42)
第三节 晶面符号 .....	(44)
第四节 晶棱符号 .....	(45)
第五节 晶带符号与晶带定律 .....	(46)
第六章 单形与聚形 .....	(49)
第一节 单形 .....	(49)
第二节 聚形 .....	(63)
第七章 晶体的规则连生 .....	(68)
第一节 平行连生 .....	(68)
第二节 双晶 .....	(68)
第三节 浮生与交生 .....	(76)

<b>第八章 晶体结构</b> .....	(78)
第一节 14 种布拉维空间格子 .....	(78)
第二节 晶体结构的对称性 .....	(83)
第三节 晶体结构类型与典型结构 .....	(92)
第四节 晶格缺陷.....	(93)
<b>第九章 晶体化学</b> .....	(100)
第一节 晶体结构的紧密堆积原理 .....	(100)
第二节 配位关系 .....	(102)
第三节 键型与晶格类型 .....	(104)
第四节 类质同象 .....	(108)
第五节 同质多象 .....	(111)
第六节 多型 .....	(113)
第七节 有序度 .....	(114)

## 第二篇 矿物学

<b>第十章 矿物与矿物学的发展趋势</b> .....	(117)
第一节 矿物的概念 .....	(117)
第二节 矿物学发展简史及其现状 .....	(118)
第三节 人类可持续发展对未来矿物学的要求 .....	(119)
<b>第十一章 矿物的形态</b> .....	(121)
第一节 矿物单体的结晶习性与表面微形貌 .....	(121)
第二节 矿物集合体的形态 .....	(124)
<b>第十二章 矿物的物理性质</b> .....	(127)
第一节 矿物的光学性质 .....	(127)
第二节 矿物的力学性质 .....	(132)
第三节 矿物的其他物理性质 .....	(136)
<b>第十三章 矿物的化学成分</b> .....	(139)
第一节 地壳化学元素丰度及其矿物学意义 .....	(139)
第二节 元素的离子类型 .....	(139)
第三节 矿物晶体化学式 .....	(141)
第四节 矿物化学组成的计量特性及其变化 .....	(144)
第五节 胶体矿物及其组成 .....	(144)
第六节 矿物中水的赋存状态 .....	(145)
<b>第十四章 矿物的命名与分类</b> .....	(147)
第一节 矿物的命名 .....	(147)
第二节 矿物的分类 .....	(148)
<b>第十五章 自然元素矿物大类</b> .....	(149)
第一节 概述 .....	(149)
第二节 金属元素矿物类 .....	(150)
配位型金属元素矿物亚类 .....	(150)
自然金族 .....	(150)
自然铜 (Copper) .....	(151)
自然金 (Gold) .....	(151)
自然银 (Silver) .....	(152)
自然铂族 .....	(152)
自然铂 (Platinum) .....	(153)
第三节 半金属元素矿物类 .....	(153)
链状半金属元素矿物亚类 .....	(153)

自然碲族 .....	(153)
自然碲 (Selenium) .....	(153)
层状半金属元素矿物亚类 .....	(154)
自然砷族 .....	(154)
自然铋 (Bismuth) .....	(154)
第四节 非金属元素矿物类 .....	(154)
环状非金属元素矿物亚类 .....	(154)
自然硫族 .....	(154)
自然硫 (Sulphur) .....	(154)
层状非金属元素矿物亚类 .....	(155)
石墨族 .....	(155)
石墨 (Graphite) .....	(155)
配位型非金属元素矿物亚类 .....	(155)
金刚石族 .....	(155)
金刚石 (Diamond) .....	(155)
第十六章 金属互化物 (天然合金) 矿物大类 .....	(157)
第一节 概述 .....	(157)
第二节 硅化物矿物类 .....	(158)
罗布莎矿族 .....	(158)
罗布莎矿 (Luobushaite) .....	(158)
藏布矿族 .....	(159)
藏布矿 (Zangboite) .....	(159)
第三节 碳化物矿物类 .....	(159)
桐柏矿族 .....	(160)
桐柏矿 (Tongbaite) .....	(160)
碳硅石族 .....	(160)
碳硅石 (Moissanite) .....	(160)
曲松矿族 .....	(161)
曲松矿 (Qusongite) .....	(161)
雅鲁矿族 .....	(161)
雅鲁矿 (Yarlongite) .....	(161)
陨碳铁矿族 .....	(161)
陨碳铁矿 (Cohenite) .....	(161)
陨磷铁矿族 .....	(162)
陨磷铁矿 (Schreibersite) .....	(162)
第十七章 硫化物及其类似化合物矿物大类 .....	(163)
第一节 概述 .....	(163)
第二节 硫化物矿物类 .....	(166)
岛状硫化物矿物亚类 .....	(166)
黄铁矿-白铁矿族 .....	(166)
黄铁矿 (Pyrite) .....	(166)
白铁矿 (Marcasite) .....	(166)
辉砷钴矿-毒砂族 .....	(167)
辉砷钴矿 (Cobaltite) .....	(167)
毒砂 (Arsenopyrite) .....	(167)
环状分子型硫化物矿物亚类 .....	(168)
雄黄族 .....	(168)
雄黄 (Realgar) .....	(168)
链状硫化物矿物亚类 .....	(168)
辉锑矿族 .....	(168)
辉锑矿 (Stibnite 或 Antimonite) .....	(168)

辉铋矿 (Bismuthinite) .....	(169)
辰砂族 .....	(170)
辰砂 (Cinnabar) .....	(170)
脆硫锑铅矿族 .....	(170)
脆硫锑铅矿 (Jamesonite) .....	(170)
层状硫化物矿物亚类 .....	(171)
辉钼矿族 .....	(171)
辉钼矿 (Molybdenite) .....	(171)
铜蓝族 .....	(171)
铜蓝 (Covellite) .....	(171)
雌黄族 .....	(172)
雌黄 (Orpiment) .....	(172)
架状硫化物矿物亚类 .....	(173)
辉银矿族 .....	(173)
辉银矿 (Argentite) .....	(173)
黝铜矿族 .....	(173)
黝铜矿-砷黝铜矿 (Tetrahedrite-Tennantite) .....	(174)
配位型硫化物矿物亚类 .....	(174)
闪锌矿族 .....	(174)
闪锌矿 (Sphalerite) .....	(174)
黄铜矿族 .....	(175)
黄铜矿 (Chalcopyrite) .....	(175)
斑铜矿族 .....	(176)
斑铜矿 (Bornite) .....	(176)
方铅矿族 .....	(176)
方铅矿 (Galena) .....	(176)
磁黄铁矿族 .....	(177)
磁黄铁矿 (Pyrrhotite) .....	(177)
辉铜矿族 .....	(177)
辉铜矿 (Chalcocite) .....	(177)
硫锑银矿族 .....	(177)
硫锑银矿 (浓红银矿) (Pyrargyrite) .....	(177)
硫锑银矿 (淡红银矿) (Proustite) .....	(178)
第三节 硫化物的类似化合物矿物类 .....	(178)
红砷镍矿 (Niccolite) .....	(178)
第十八章 氧化物和氢氧化物矿物大类 .....	(180)
第一节 概述 .....	(180)
第二节 氧化物矿物类 .....	(182)
岛状氧化物矿物亚类 .....	(182)
砷华族 .....	(182)
砷华 (Arsenolite) .....	(182)
链状氧化物矿物亚类 .....	(182)
金红石族 .....	(183)
金红石 (Rutile) .....	(183)
锡石 (Cassiterite) .....	(184)
软锰矿 (Pyrolusite) .....	(184)
斯石英 (Stishovite) .....	(184)
黑钨矿族 .....	(185)
黑钨矿 (钨锰铁矿) (Wolframite) .....	(185)
铌钽铁矿族 .....	(185)
铌钽铁矿 (Columbite-Tantalite) .....	(185)

锑华族 .....	(186)
锑华 (Valentinite) .....	(186)
架状氧化物矿物亚类 .....	(187)
石英族 .....	(187)
石英 (Quartz) .....	(188)
$\beta$ -石英 ( $\beta$ -Quartz) .....	(190)
蛋白石 (Opal) .....	(190)
锐钛矿族 .....	(190)
锐钛矿 (Anatase) .....	(190)
赤铜矿族 .....	(191)
赤铜矿 (Cuprite) .....	(191)
钙钛矿族 .....	(191)
钙钛矿 (Perovskite) .....	(191)
易解石族 .....	(192)
易解石 (Aeschynite) .....	(192)
配位型氧化物矿物亚类 .....	(192)
刚玉族 .....	(193)
刚玉 (Corundum) .....	(193)
赤铁矿 (Hematite) .....	(194)
钛铁矿 (Ilmenite) .....	(194)
尖晶石族 .....	(195)
尖晶石 (Spinel) .....	(195)
磁铁矿 (Magnetite) .....	(196)
铬铁矿 (Chromite) .....	(196)
金绿宝石族 .....	(196)
金绿宝石 (Chrysoberyl) .....	(196)
晶质铀矿族 .....	(197)
晶质铀矿 (Uraninite) .....	(197)
第三节 氢氧化物矿物类 .....	(197)
链状氢氧化物矿物亚类 .....	(198)
硬水铝石族 .....	(198)
硬水铝石 (Diaspore) .....	(198)
针铁矿 (Goethite) .....	(198)
水锰矿族 .....	(199)
水锰矿 (Manganite) .....	(199)
硬锰矿族 .....	(199)
硬锰矿 (Psilomelane) .....	(199)
层状氢氧化物矿物亚类 .....	(200)
水镁石族 .....	(200)
水镁石 (氢氧化镁石) (Brucite) .....	(200)
三水铝石族 .....	(200)
三水铝石 (Gibbsite) .....	(200)
第十九章 含氧盐矿物大类 (一): 硅酸盐矿物类 .....	(202)
第一节 概述 .....	(203)
一、化学成分与晶体化学特点 .....	(203)
二、形态与物理性质 .....	(208)
三、成因产状 .....	(209)
四、亚类划分 .....	(209)
第二节 岛状硅酸盐矿物亚类 .....	(210)
锆石族 .....	(210)
锆石 (Zircon) .....	(210)

石榴子石族 .....	(211)
石榴子石 (Garnet) .....	(211)
橄榄石族 .....	(213)
橄榄石 (Olivine) .....	(213)
红柱石族 .....	(214)
红柱石 (Andalusite) .....	(215)
蓝晶石 (Kyanite) .....	(216)
黄玉族 .....	(217)
黄玉 (Topaz) .....	(217)
十字石族 .....	(217)
十字石 (Staurolite) .....	(217)
榍石族 .....	(218)
榍石 (Titanite) .....	(218)
符山石族 .....	(219)
符山石 (Vesuvianite) .....	(219)
绿帘石族 .....	(219)
绿帘石 (Epidote) .....	(219)
第三节 环状硅酸盐矿物亚类 .....	(220)
绿柱石族 .....	(220)
绿柱石 (Beryl) .....	(220)
堇青石族 .....	(221)
堇青石 (Cordierite) .....	(221)
电气石族 .....	(221)
电气石 (Tourmaline) .....	(221)
第四节 链状硅酸盐矿物亚类 .....	(222)
辉石族 .....	(222)
斜方辉石亚族 .....	(224)
顽火辉石 (Enstatite) .....	(224)
古铜辉石 (Bronzite)、紫苏辉石 (Hypersthene)、铁紫苏辉石 (Ferrohypersthene)、	
尤来辉石 (Eulite) .....	(225)
斜方铁辉石 (Orthoferrosilite) .....	(225)
单斜辉石亚族 .....	(225)
透辉石 (Diopside)-钙铁辉石 (Hedenbergite) .....	(226)
普通辉石 (Augite) .....	(226)
硬玉 (Jadeite) .....	(226)
锂辉石 (Spodumene) .....	(227)
霓石 (Aegirine) .....	(227)
硅灰石族 .....	(228)
硅灰石 (Wollastonite) .....	(228)
蔷薇辉石族 .....	(228)
蔷薇辉石 (Rhodonite) .....	(229)
角闪石族 .....	(229)
斜方闪石亚族 .....	(231)
直闪石 (Anthophyllite) .....	(231)
单斜闪石亚族 .....	(231)
镁铁闪石 (Cummingtonite) .....	(231)
透闪石 (Tremolite)-阳起石 (Actinolite) .....	(232)
普通角闪石 (Hornblende) .....	(232)

蓝闪石 (Glaucophane) .....	(232)
钠闪石 (Riebeckite) .....	(233)
矽线石族 .....	(233)
矽线石 (Sillimanite) .....	(233)
第五节 层状硅酸盐矿物亚类 .....	(234)
蛇纹石-高岭石族 .....	(237)
蛇纹石亚族 .....	(237)
利蛇纹石 (Lizardite)、叶蛇纹石 (Antigorite)、纤蛇纹石 (Chrysotile) .....	(237)
高岭石亚族 .....	(238)
高岭石 (Kaolinite) .....	(238)
滑石-叶蜡石族 .....	(238)
滑石 (Talc) .....	(238)
叶蜡石 (Pyrophyllite) .....	(239)
云母族 .....	(240)
白云母亚族 .....	(240)
白云母 (Muscovite) .....	(240)
海绿石 (Glauconite) .....	(240)
黑云母亚族 .....	(241)
黑云母 (Biotite)-金云母 (Phlogopite) .....	(241)
锂云母 (Lepidolite) .....	(241)
绿泥石族 .....	(242)
绿泥石 (Chlorite) .....	(242)
伊利石族 .....	(242)
伊利石 (Illite) .....	(242)
埃洛石族 .....	(243)
埃洛石 (Halloysite) .....	(243)
蒙脱石-蛭石族 .....	(243)
蒙脱石亚族 .....	(244)
蒙脱石 (Montmorillonite) .....	(244)
蛭石亚族 .....	(244)
蛭石 (Vermiculite) .....	(244)
坡缕石族 .....	(245)
坡缕石 (Palygorskite) .....	(245)
海泡石 (Sepiolite) .....	(246)
葡萄石族 .....	(247)
葡萄石 (Prehnite) .....	(247)
第六节 架状硅酸盐矿物亚类 .....	(247)
长石族 .....	(247)
碱性长石亚族 .....	(251)
透长石 (Sanidine) .....	(252)
正长石 (Orthoclase) .....	(252)
微斜长石 (Microcline) .....	(253)
冰长石 (Adularia) .....	(254)
歪长石 (Anorthoclase) .....	(254)
斜长石亚族 .....	(254)
斜长石 (Plagioclase) .....	(255)
钠长石亚族 .....	(256)
钠长石 (Celsian) .....	(256)

似长石族 .....	(256)
霞石亚族 .....	(256)
霞石 (Nepheline) .....	(256)
白榴石亚族 .....	(257)
白榴石 (Leucite) .....	(257)
方柱石亚族 .....	(258)
方柱石 (Scapolite) .....	(258)
方钠石亚族 .....	(258)
方钠石 (Sodalite) .....	(258)
沸石族 .....	(259)
浊沸石亚族 .....	(260)
浊沸石 (Laumontite) .....	(260)
片沸石亚族 .....	(260)
片沸石 (Heulandite) .....	(260)
方沸石亚族 .....	(261)
方沸石 (Analcime) .....	(261)
<b>第二十章 含氧盐矿物大类 (二)</b> .....	(264)
<b>第一节 碳酸盐矿物类</b> .....	(264)
<b>岛状碳酸盐矿物亚类</b> .....	(264)
方解石族 .....	(264)
方解石 (Calcite) .....	(265)
菱镁矿 (Magnesite) .....	(266)
菱铁矿 (Siderite) .....	(267)
菱锰矿 (Rhodochrosite) .....	(267)
菱锌矿 (Smithsonite) .....	(267)
白云石族 .....	(268)
白云石 (Dolomite) .....	(268)
文石族 .....	(269)
文石 (Aragonite) .....	(269)
碳铈矿 (Strontianite) .....	(269)
碳钡矿 (Witherite) .....	(270)
白铅矿 (Cerussite) .....	(270)
钡解石族 .....	(271)
钡解石 (Barytocalcite) .....	(271)
<b>链状碳酸盐矿物亚类</b> .....	(271)
孔雀石族 .....	(271)
孔雀石 (Malachite) .....	(271)
蓝铜矿 (Azurite) .....	(272)
<b>层状碳酸盐矿物亚类</b> .....	(272)
天然碱族 .....	(272)
天然碱 (Trona) .....	(272)
<b>第二节 硫酸盐矿物类</b> .....	(272)
<b>岛状硫酸盐矿物亚类</b> .....	(273)
重晶石族 .....	(273)
重晶石 (Barite) .....	(273)
天青石 (Celestine) .....	(274)
硬石膏族 .....	(274)
硬石膏 (Anhydrite) .....	(274)

层状硫酸盐矿物亚类 .....	(275)
石膏族 .....	(275)
石膏 (Gypsum) .....	(275)
第三节 磷酸盐矿物类 .....	(275)
岛状磷酸盐矿物亚类 .....	(276)
独居石族 .....	(276)
独居石 (Monazite) .....	(276)
链状磷酸盐矿物亚类 .....	(277)
磷灰石族 .....	(277)
磷灰石 (Apatite) .....	(277)
层状磷酸盐矿物亚类 .....	(278)
铜铀云母族 .....	(278)
铜铀云母 (Torbernite) .....	(278)
架状磷酸盐矿物亚类 .....	(279)
绿松石族 .....	(279)
绿松石 (Turquoise) .....	(279)
第四节 硼酸盐矿物类 .....	(279)
岛状硼酸盐矿物亚类 .....	(280)
硼镁铁矿族 .....	(280)
硼镁铁矿 (Ludwigite) .....	(280)
硼镁石族 .....	(281)
硼镁石 (Ascharite) .....	(281)
环状硼酸盐矿物亚类 .....	(281)
硼砂族 .....	(281)
硼砂 (Borax) .....	(281)
架状硼酸盐矿物亚类 .....	(282)
方硼石族 .....	(282)
方硼石 (Boracite) .....	(282)
第五节 钨酸盐、钼酸盐和铬酸盐矿物类 .....	(283)
白钨矿族 .....	(283)
白钨矿 (Scheelite) .....	(283)
钼铅矿族 .....	(284)
钼铅矿 (Wulfenite) .....	(284)
铬铅矿族 .....	(285)
铬铅矿 (Crocoite) .....	(285)
第六节 硝酸盐矿物类 .....	(285)
钠硝石族 .....	(286)
钠硝石 (Nitratine) .....	(286)
第二十一章 卤化物矿物大类 .....	(287)
第一节 概述 .....	(287)
第二节 氟化物矿物类 .....	(288)
配位型氟化物矿物亚类 .....	(288)
萤石族 .....	(288)
萤石 (Fluorite) .....	(288)
第三节 氯化物矿物类 .....	(289)
配位型氯化物矿物亚类 .....	(289)
石盐族 .....	(289)
石盐 (Halite) .....	(289)

钾盐 (Sylvite) .....	(289)
光卤石族 .....	(290)
光卤石 (Carnallite) .....	(290)
角银矿族 .....	(290)
角银矿 (Chlorargyrite) .....	(290)
<b>第二十二章 有机矿物及准矿物大类</b> .....	(291)
第一节 有机酸盐矿物类 .....	(292)
草酸铁矿 (Humboldtine) .....	(292)
水草酸钙石 (Whewellite) .....	(292)
草酸钙石 (Weddellite) .....	(293)
草酸铵石 (Oxammite) .....	(293)
蜜蜡石 (Mellite) .....	(293)
第二节 碳氢化合物和氧化的碳氢化合物矿物类 .....	(294)
地蜡 (Native Paraffin) .....	(294)
第三节 有机准矿物类 .....	(294)
琥珀 (Amber) .....	(294)
沥青 (Pitch) .....	(295)
煤 (Coal) .....	(295)
泥炭 (Peat) .....	(295)
褐煤 (Liqgit) .....	(295)
烟煤 (Bituminous coal) .....	(296)
无烟煤 (Anthracitr) .....	(296)
<b>第二十三章 矿物的形成、演化与共生组合</b> .....	(297)
第一节 地球与宇宙矿物的分布 .....	(297)
第二节 矿物形成作用与共生组合 .....	(303)
第三节 矿物的演化 .....	(306)
第四节 矿物标型 .....	(309)
<b>第二十四章 矿物分析测试的现代方法</b> .....	(314)
第一节 矿物样品的采集与分选 .....	(315)
第二节 矿物微形貌研究方法 .....	(316)
第三节 矿物成分分析方法 .....	(319)
第四节 矿物物相及结构分析方法 .....	(323)
第五节 矿物物理性质测定与研究方法 .....	(326)
第六节 矿物年代学研究方法 .....	(327)
<b>第二十五章 矿物的加工利用技术</b> .....	(330)
第一节 矿物原料的破碎与选矿 .....	(330)
第二节 金属矿物的加工技术 .....	(332)
第三节 非金属矿物的加工技术 .....	(334)
第四节 矿物的人工合成技术 .....	(335)
<b>主要参考文献</b> .....	(337)
<b>附录 1 结晶学与矿物学网络资源简介</b> .....	(338)
<b>附录 2 常见矿物符号</b> .....	(346)

# 第一篇 结晶学基础

## 第一章 晶体与晶体的基本性质

### 本章概要

- 1) 晶体、非晶质体;近程有序、长程有序、周期性平移。
- 2) 空间格子(空间点阵);结点、行列、面网、平行六面体;单位晶胞与平行六面体的关系。
- 3) 晶体的6条基本性质。

### 第一节 结晶学研究对象及其科学地位

地球科学的研究对象是地球的整体,它研究固体地球的物质组成、运动或存在形式及其形成与变化的条件和过程。“结晶学与矿物学”是地球科学专业的主干课程,其教学目的,便是理解和掌握地球固体物质(目前尚包括月岩及陨石)基本组成单位的矿物,理解和掌握其主要内外属性、形成作用及其在人类生产生活中的用途。由于矿物是天然产出的晶体,其内外属性、形成变化和用途的认识都将以结晶学理论为基础。为此,我们将以结晶学作为本课程的先导性内容。

结晶学(Crystallography)是以晶体为研究对象,以晶体的生成和变化、晶体外部形态的几何性质、晶体的内部结构、化学组成和物理性质及其相互关系为研究内容的一门自然科学。它主要包括以下分支:

- 研究晶体外部几何形态及其规律性的几何结晶学(geometrical crystallography)。
- 研究晶体内部结构中质点排列规律及其缺陷的晶体结构学(crystallogology)。
- 研究晶体发芽、生长和变化过程与机理的晶体发生学(crystallogeny)。
- 研究晶体化学组成和结构及其关系的晶体化学(crystallochemistry)。
- 研究晶体物理性质及其产生机理的晶体物理学(crystallophysics)。

结晶学的学科体系是在作为矿物学分支之一的几何结晶学基础上发展起来的,其形成历史大约经历了300余年。19世纪中叶以来,人们不断探索晶体的内部结构特征,在19世纪末期形成了较成熟的几何模型,开始研究人工合成晶体,并逐渐与数学、物理学和化学相融合,从而脱离了矿物学而成为一门有自身完整体系的独立学科。1912年,人类成功利用X射线具体测定了晶体的结构,大大推动了结晶学的飞速发展。尤其是到20世纪末期,借助于透射电子显微镜等微束分析及谱学技术,人类实现了直接观察和分析晶体内部原子排列及其电子状态的梦想,使结晶学跨入了以微区、精细为特征的现代研究阶段。

如前所述,现代结晶学以与数、理、化等基础学科的高度融合为特征,因此学好数理化学,对深入进行结晶学的研究是十分必要的。此外,由于结晶学是矿物学的先导课程,因此也是与矿物学有关的其他地球物质科学如岩石学、矿床学、宝石学、地球化学、土壤学,与矿物学有关的研究地球物质运动形式的构造地质学,研究地球物质形成与变化过程的地层学和古生物学,研究地球物质与生物交互作用及生物体中结晶物质的地球生物学、生命矿物学和矿物药理学的重要基础。在应用科学技术领域,许多学科如选矿学、冶金学、金属与非金属材料学、化学工艺学、药物

学等,都与结晶学有着密切的联系。因此,结晶学不仅是地球科学及其延伸学科的重要专业基础,也是许多其他关乎国计民生的理论和技术科学的重要专业基础。

## 第二节 晶体、非晶质体与准晶体的概念

### 1. 晶体与非晶质体

晶体是人类日常生产生活中随时可见的一种物质,我们厨房里的食盐、冰糖、刀叉、陶碗,冬天的冰雪,大地里的土壤和岩石,工厂里的许多固体化学药品等,都是由晶体组成的。我们的古人对晶体的认识是从具有几何多面体外形且透明的水晶(石英  $\text{SiO}_2$ , 图 1-1a)开始的,之后又将天然产出的具有几何多面体外形的固体,如图 1-1 所示的方解石和黄铁矿等,均称为晶体。显然,这种认识并不全面。例如,石英这种物质在自然界既可以呈多面体形态的水晶产出,也可以呈外形不规则的颗粒状生成于岩石之中。这两种形态的石英,其成分、物性和内部结构等并无不同。因此,仅仅从有无规则几何多面体的形态来区分是否为晶体,不能反映晶体的本质。

尽管如此,人们在实践中也逐渐认识到,只要具备良好的生长条件,特别是空间条件,所有晶体都能自发地长成规则的几何多面体。这种现象必然与其内部结构有关。由此推测晶体是由呈平行六面体的小块堆积而成的,具有格子构造。1912 年,德国物理学家劳埃(M. V. Laue)利用 X 射线衍射分析技术测定了石盐的晶体结构,后来人们又对大量晶体进行了 X 射线衍射分析,从而证明,一切晶体,无论外形如何,其内部质点(原子、离子或分子)都是作规律排列的。这种规律表现为质点在三维空间作周期性的平移重复,从而构成了所谓的格子构造。在 20 世纪末期这一认识更得到透射电子显微镜的直观证明。下面以石盐( $\text{NaCl}$ )的晶体结构为例,来说明晶体内部质点的排列规律。

图 1-2 表示从石盐内部结构中割取出来的由  $\text{Cl}^-$  离子和  $\text{Na}^+$  离子堆积而成的立方体小块。其中的  $\text{Cl}^-$  离子和  $\text{Na}^+$  离子沿立方体小块的棱方向以 0.5628 nm 的间隔交替排列,而在立方体的面对角线方向上各自以 0.3978 nm 的相等间隔连续排列;在其他任何方向上,虽然离子的具体排列方式和间隔各有不同,但无不以一定的间隔周期重复出现,从而构成立方体格子构造。石盐之所以能在一定条件下生长成规则的立方体外形,就是由它内部的这种格子构造所决定的。

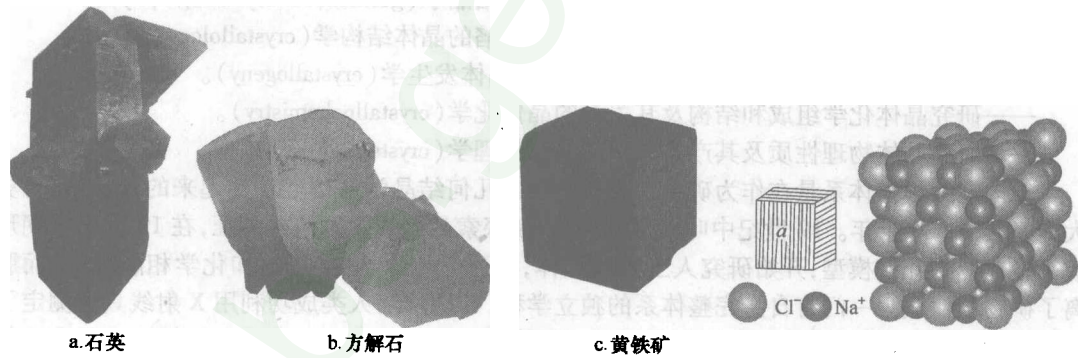


图 1-1 具几何多面体外形的晶体

图 1-2 石盐的晶体结构

对于其他任何一种晶体而言,情况都是类似的:无论外形是否规则,它们的内部质点在三维空间都有规律地呈周期性平移重复排列而形成格子状构造,这是无例外地为一切晶体所共有的性质。所不同的仅仅是,不同的晶体,它们的质点种类不同,排列的方式和间隔大小相应地也就不同罢了。

晶体的上述特性,反映了晶体与呈其他状态物体之间的根本区别。因此,晶体(crystal)的现

代定义是:晶体是内部质点在三维空间呈周期性平移重复排列而形成格子构造的固体。相应地,内部质点在三维空间成周期性平移重复排列的固态物质,便称为结晶质。习惯上,有时仍然将“晶体”这一名称专门用以指具有几何多面体外形的晶体,而将不具几何多面体外形的晶体称为“晶粒”或“晶块”。

非晶质体是与晶体相对立的概念,它也是一种固态物质,但内部质点在三维空间不成周期性平移重复排列。非晶质体与晶体在结构上的差异,可从图 1-3 所示晶体和玻璃中质点的平面分布看出:在晶体(图 1-3a)中,一种质点(黑点)周围的另一种质点(小圆圈)的排列相同,即每个黑点都被分布于三角形顶点的三个圆圈所围绕,而每个圆圈均居于以两个黑点为端点的直线中央。这种质点局部分布的规律性叫做近程规律或短程有序(short range order)。不仅如此,晶体中每个质点(黑点或圆圈)在整个图形中各自都呈现有规律的周期性平移重复,把周期重复的点用直线联结起来,可获得平行四边形网格。可以想像,在三维空间,这种网格将构成空间格子。这种质点排布方式在整个晶体中贯穿始终的规律称为远程规律或长程有序(long range order)。在非晶质体如玻璃体(图 1-3b)中,质点虽然可以是短程有序的(每个黑点为三个圆圈围绕),但不存在远程规律,与液体的结构相似。

在一定的条件下,晶体和非晶质体是可以相互转化的。例如,由岩浆快速冷凝形成的非晶态的火山玻璃,在以后的地质年代中,通过其内部质点极其缓慢的自发的扩散、调整过程而趋于规则排列,实现由非晶态逐渐向结晶态的转化。该过程以首先形成一些细小而状如苔藓、毛发或花瓣的所谓雏晶(图 1-4)开始,而后逐渐长大,最终变成晶质矿物。这种由非晶质体经调整其内部质点的排列方式而向晶体转变的作用,我们称之为脱玻化(devitrification)或晶化(crystallizing)作用。相反的变化,即晶体因内部质点的规则排列遭受破坏而向非晶质体转化的作用,则称为玻璃化(vitrification)或非晶化(non-crystallizing)作用。例如一些含放射性元素的矿物,由于受到放射性蜕变时所发出的 $\alpha$ -射线之作用,晶格遭到破坏而转变为非晶态的“变生矿物”,但仍可保持原来的几何多面体外形。

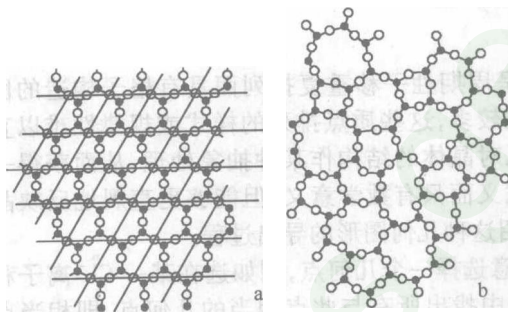


图 1-3 晶体(a)与玻璃(b)中质点平面分布示意图  
(据潘兆璁等,1993)

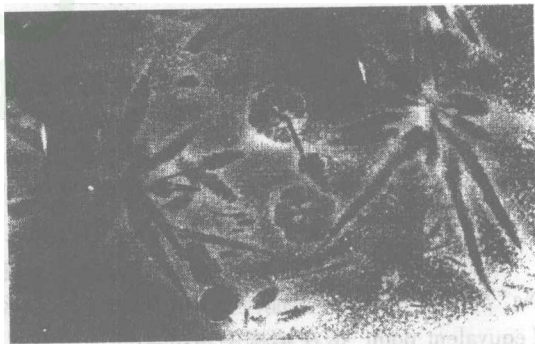


图 1-4 火山玻璃脱玻化而成的花瓣状雏晶  
(据路凤香等,2001)

应当指出的是,晶体由于其内部质点都呈规律排列而处于平衡位置,其内能为最小,因而相对于同种物质的不同物态而言,它是最稳定的,所以,玻璃化作用的发生,肯定地总是与能量的传入和物质成分的变化相联系的;但脱玻化作用则完全可以自发进行。

正因为晶体是最稳定的,因而其分布极为广泛,除自然生成的矿物外,许多食品、生活用品、化工制品等都是晶体。天然晶体形态多样,大小悬殊,大者可重达百吨,直径达数十米;小的则仅几个微米甚至若干纳米大小,需借助显微镜甚至电子显微镜或 X 射线分析才能识别。相比之

下,非晶质体在自然产出的物质中仅有像琥珀、树脂、沥青、火山玻璃、水铝英石几种以及少数变生矿物(如褐钨铀矿、褐帘石等),在非天然物质中也只有诸如玻璃、塑料等少数几种,这与非晶质体的不稳定性是密切相关的。

### 2. 准晶体

1984 年,Shechtman 和 Cahn,以及我国学者叶恒强和郭可信等人分别在急冷凝固的  $Al_{12}Mn$  和  $(Ti_{1.9}V_{0.1})_2Ni$  合金中各自独立发现了一种质点分布呈短程有序和非整周期平移重复的新的凝聚态物质。后来,人们在许多合金中发现具有类似性质的物质,它们具有传统结晶学中不存在的 5 次或 6 次以上如 8 次、10 次、12 次等旋转对称(图 1-5)。这种特殊的固体被称为准晶体。起初,人们认为准晶体是在结构上介于非晶体和晶体之间的一类固体,但其结构形式一直不甚明了。目前,人们趋向于认为:准晶体(quasicrystal)是质点的排列符合短程有序,有严格的位置序和自相似分形结构但不体现周期平移重复,即不存在格子构造的一类固体。

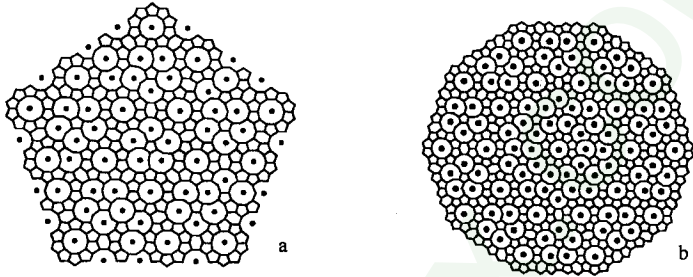


图 1-5 具 5 次(a)和 10 次(b)对称轴的准晶体结构图  
(据彭志忠,1988)

## 第三节 空间格子

### 1. 空间格子的导出

在上一节中,我们已经知道晶体是内部质点呈周期性平移重复排列而具有格子构造的固体。对于大多数晶体而言,由于其内部的质点种类较多,这些质点排列的样式或规律性难以直接观察。为了进一步揭示这种重复规律,我们可以对晶体的结构作某种抽象处理,从而获得一种简单的几何图形,这种图形没有物理和化学的意义而只有数学意义,但能够更直观地反映晶体的格子构造。下面我们以氯化钠晶体为例来介绍这种几何图形的导出过程。

在氯化钠的平面结构图(图 1-6a)中,首先任意选择一个几何点,例如选在某一  $Cl^-$  离子和  $Na^+$  离子的接触点(其他位置也可以),然后在结构中找出所有与此点相当的几何点,即相当点(equivalent point,指在结构中占据相同的位置且周围环境和位向完全相同的点)。这些点都毫无例外地占据  $Cl^-$  离子和  $Na^+$  离子接触点的位置,且每一几何点,上面必定为一  $Na^+$  离子而下面为

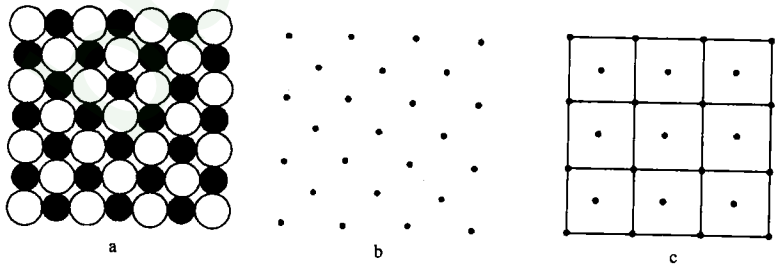


图 1-6 氯化钠的平面结构图(a)及其导出的平面点阵(b)和平面网格(c)

—  $\text{Cl}^-$  离子。这样一系列相当点的集合,便构成了一个平面点阵(图 1-6b),其中的相当点称为阵点。按照一定法则将这些阵点用直线相连,便能构成一个由平行四边形组成的平面网格(图 1-6c)。不难想像,在氯化钠的三维结构图中找出来的所有相当点的集合必然构成一个空间点阵,按照一定法则将其阵点用直线相连,便能构成一个由平行六面体共面堆积而成的空间格子。显然,不论开始时的那个点选在哪里,由其相当点构成的空间点阵必定也是在三维空间呈周期性重复并能体现氯化钠晶体中  $\text{Cl}^-$  离子和  $\text{Na}^+$  离子的分布规律的。

显然,对于其他任何晶体,不管其结构如何复杂,只要任意选定一个点并将其所有的相当点找出来,就能得到一个颇为简单的空间点阵和相应的空间格子,从而揭示其内部质点的重复规律。对于同一结构型的晶体而言,所得出的空间点阵应当是完全相同的;而对于不同结构型的晶体而言,当然又是有区别的。

综上所述,所谓“空间格子”(space lattice)就是表示晶体内部质点在三维空间作周期性平移重复排列规律的几何图形。它是空间点阵(space lattice)中的阵点(lattice point)依一定法则相连而成的,在英文中两者为同一单词。空间格子以简捷的形式反映了晶体格子构造的特点,从微观角度看是一种无限图形。

## 2. 空间格子要素及其基本规律

空间格子有结点、行列、面网和平行六面体等 4 种要素。它们的特点和遵循的规律如下。

### (1) 结点

结点(node)是空间点阵中的阵点,它代表晶体结构中的相当点,只具数学意义,为几何点。

### (2) 行列

分布在同一直线上的结点构成一个行列(row)。显然,任意两个结点就可以决定一条行列。在同一条行列上任意两个相邻结点之间的距离,称为结点间距(row-spacing)。结点间距反映了质点在该行列方向上的最小重复周期。在一个空间格子中,可以有无穷多不同方向的行列,但同一行列上结点间距相等、相互平行的行列,其结点间距也必定相等;不同方向上的行列,结点间距可能相等,也可能不相等。由此可见,在某些方向上的行列结点分布较密,而在有些方向上结点分布较稀疏。

### (3) 面网

联结分布在同一平面上的结点便构成一个面网(net)(图 1-7)。显然,空间格子中不在同一行列的任意 3 个结点就可以决定一个面网的方向,换言之,任意两个相交的行列可以决定一个面网。面网上单位面积内结点的密度称为面网密度(reticular density)。任意两个相邻面网之间的垂直距离称为面网间距(interplanar spacing)。在一个空间格子中,可以有无穷多不同方向的面网,相互平行的面网,面网密度相等;不同方向的面网一般面网密度不相等。

面网密度与面网间距之间存在着一定的关系。图 1-8 所示为分布在纸平面上的一些结点,现垂直于纸平面作不同方向的可能面网,它们与纸平面的交线分别为  $AA'$ ,  $BB'$ , ……行列。不难理解,这些行列的结点间距越大,相应面网的面网密度就越小。另外,随着这些行列的结点间距越来越大,它们与某一固定行列  $AD$  之间的交角  $\beta_i$  则越来越小,而相应的面网间距  $d_i$  又与  $\sin\beta_i$  ( $i=1,2,3,\dots$ )成正比,即

$$d_i = \sin b_0 \sin \beta_i$$

式中:  $b_0$  为行列  $AD$  的结点间距。所以,面网密度越大,相应的面网间距也越大;反之,面网密度越小,相应的面网间距也越小。

### (4) 平行六面体

空间格子中可以划分出一个最小的重复单位,那就是平行六面体(parallel hexahedron)(图 1-9),它由 6 个两两平行且相等的面组成。整个空间格子可以看作是平行六面体在三维空间平行地、毫无间隙地重复累叠而成的。结点就分布在平行六面体的角顶上,每一平行六面体的 3

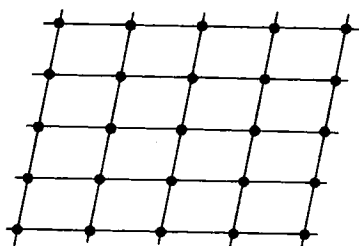


图 1-7 空间格子中的结点、  
行列与面网

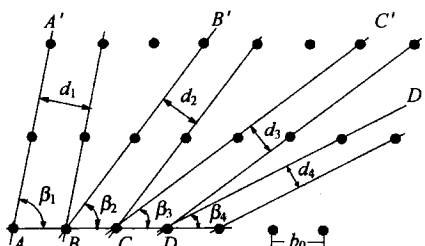


图 1-8 面网密度与面网  
间距关系示意图  
(据罗谷风,1985)

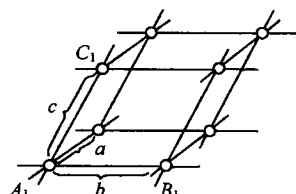


图 1-9 平行六面体

组棱长( $a, b, c$ )恰好就是 3 个相应行列的结点间距(图 1-9)。在实际晶体结构中,与空间格子中单位平行六面体相对应的部分称为单位晶胞(unit cell)。

## 第四节 晶体的基本性质

由于一切晶体内部质点的排列都遵循格子构造的规律而与其他物质相区别,因此所有晶体应该具有一些由格子构造所决定的共同区别于其他物质的性质,我们把这些性质称为晶体的基本性质。现简述如下。

### 1. 自限性

晶体的自限性(self-confinement)是指晶体在合适条件下生长时总能自发地形成具有一定凸几何多面体外形的性质。在晶体的凸几何多面体上,平整的面称为晶面,两个晶面的交线称为晶棱,晶棱汇聚成的尖顶称为角顶。晶面数( $F$ )、晶棱数( $E$ )和角顶数( $V$ )的关系符合欧拉定律:

$$F + V = E + 2$$

晶体的几何多面体形态,是晶体内部格子构造的外部表现。晶体外形上的晶面、晶棱与角顶,实际上对应着格子构造中的面网、行列及结点。晶体的格子构造及其所制约的凸多面体形态均服从于一定的结晶学规律。

应当注意的是,准晶体也具有自限性。

### 2. 均一性

晶体的均一性(homogeneity)是指同一晶体的任何部位其性质是完全相同的。例如,假定我们把一个晶体分成许多小晶块,那么每一块这样的小晶块的物理性质与化学性质都是相同的。这主要是因为晶体的各个部分都具有相同的格子构造,也即各部分的质点分布相同,因此性质也相同。

若设在  $x$  处和  $x + x'$  处取得小晶体,则晶体的均一性可作如下数学表示:

$$F(x) = F(x + x')$$

这里的  $F$  为相应晶块的化学组成和物理性质。

必须注意的是,非晶质体也具有均一性,如玻璃的不同部分在折射率、膨胀系数、热导率等性质方面都是相同的。但非晶质体的这种均一性是统计意义上的、平均近似的均一性,称为统计均一性,它与晶体由内部格子构造决定的严格的结晶均一性有着本质的区别,而与液体和气体的统计均一性相似。

### 3. 异向性

晶体的异向性(anisotropy)指晶体的性质因观察方向的不同而表现出差异的特性。同一矿物在不同方向上其解理的发育程度存在明显的差别,这是晶体异向性最明显的例子。晶体的凸

多面体形态也是其异向性的表现。此外,晶体的刻划硬度,只要作精确的测定,都可以发现随刻划方向的不同而异,其中最明显的例子是蓝晶石。在平行蓝晶石晶体延长方向上,其硬度值约为4,而在垂直晶体延长方向上,其硬度值约为6,故蓝晶石又被称为二硬石。

由格子构造规律我们知道,晶体结构中质点排列方式和间距,在相互平行的方向上都是一致的,但在不相平行的方向上,一般来说都是有差异的。因此,当沿不同方向进行观察时,晶体的各项性质将表现出一定的差异,这就是晶体具有各向异性的根源。

#### 4. 对称性

晶体的对称性(symmetry)是指晶体中的相同部分或性质在不同的方向或位置上有规律地重复出现的特性。我们常常可以看到,在一个晶体的不同方向出现形状和大小完全相同的晶面,这就是晶体外形上的一种对称性。其实,晶体内部质点在三维空间周期性平移重复排列本身就是一种微观的对称性,尽管晶体结构中质点的排列在不同方向上一般是有差异的,但并不排斥其在某些特定方向上的重复。因此,晶体的宏观对称性是其微观对称性的体现,是晶体最重要的性质,也是晶体对称分类的基础。有关晶体的对称性,将在后续专门章节中作进一步的讨论。

#### 5. 最小内能性

晶体的最小内能性(minimum internal energy)是指,在相同的热力学条件下,较之于同种化学成分的气体、液体及非晶体而言,以晶体的内能最小。这从晶体熔融时要吸热、熔体结晶时会放热得到部分的直观证明。

晶体具有最小内能主要是因为,晶体内部质点在三维空间呈周期性重复的规律排列,这种规则排列是质点间的引力和斥力达到平衡的结果。在此情况下,无论是使质点间的距离增大或是减小,都将导致质点的势能增加。至于气体、液体和非晶质体,由于它们内部质点的排列是无规则的,因此质点间的距离不等于平衡距离,因而它们的势能比晶体大。这就意味着,在相同的热力学条件下,晶体的内能应为最小。

#### 6. 稳定性

晶体的稳定性(stability)是指,对于化学组成相同但处于不同物态下的物质而言,以晶体最为稳定。非晶体可以自发转化为晶体,释放出能量,而晶体不可能自发转化为其他物态,这就表明了晶体的稳定性。

晶体的稳定性是晶体具有最小内能的必然结果,而从根本上讲,它也是由晶体的格子构造规律所决定的。

晶体因其内部质点已达到平衡位置,具有最小内能,要破坏晶体的这种状态,就必须从外界吸收能量,如加热等。同时,由于使晶体中每个质点脱离平衡位置所需能量都是相等的,因此每种晶质体都有自己确定的熔点(非晶质体没有固定的熔点)。与此相反,无论气体、液体或是非晶质体,由于它们内部质点未达平衡位置,当使它们的质点趋向于规则排列而达到平衡位置,亦即向晶体转化时,必定会释放出多余的能量。所以,根据热力学定律,结晶态是最稳定的物态,它不会自发地转化为其他物态。

### 思考题及习题

- 1) 晶体、非晶质体、准晶体有何区别?
- 2) 结点间距、面网密度、面网间距之间有何联系?
- 3) 如何根据晶体的格子构造解释其基本性质?
- 4) 晶体不一定呈规则的几何多面体外形,这是否与晶体的自限性矛盾?
- 5) 某些固体生长时可以自发地形成规则的几何多面体外形,这些固体肯定是晶体吗?为什么?
- 6) 为什么晶体具有确定的熔点而非晶体不具有确定的熔点?

7) 图 1-10 之左和右图分别为石墨晶体结构中平行和垂直结构层的两种碳原子面。试分别以两图中的  $a, b, c$  为基点, 画出对应的相当点分布图和面网并比较之。

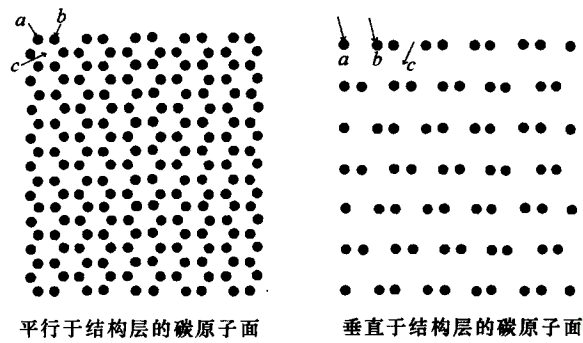


图 1-10 石墨晶体结构中碳原子的分布  
(据罗谷风, 1985)

## 第二章 晶体生长模型与面角守恒定律

### 本章概要

- 1) 晶体生长的3种途径。
- 2) 层生长模型;螺旋生长模型;布拉维法则;周期键理论。
- 3) 影响晶体生长的外因;几何淘汰律;面角守恒定律。

出自人类探幽揭秘和复制自然的心理及生产生活的实际需要,在结晶学中逐渐形成了晶体发生学分支,它研究的科学问题的核心是:晶体是怎样形成的?

我们从第一章的学习中已经认识到,晶体的所有性质都与其内部质点周期性平移重复排列有关,因此晶体的生长应当首先是在其内部结构的约束下进行的。从晶体自限性的表述我们还知道,只有在合适的物理化学条件下和合适的生长空间中,晶体才能形成规则形状的几何多面体,因此晶体的生长又是明显地受外部条件影响的。然而,无论内外因如何,晶体生长的过程和结果都是遵循着一定规律的。

在本章中,我们将简要介绍物质从非晶态的几种物相向晶质相转变的方式,重点阐述反映晶体生长内因的几个理论模型,在此基础上,介绍影响晶体生长的外部因素及其规律。

### 第一节 晶体生长的途径

晶体是在物相的转变过程中形成的。如果将物质按气相、液相和固相划分,则从相转变的角度看,晶体的形成途径也便有3种。

#### 1. 由气相转变为晶体

当某些气体处于过饱和蒸气压或过冷却温度条件时,可直接转变为晶体。从火山口喷发出来的含硫气体通过凝华作用形成自然硫晶体;空气中的水蒸气在冬季玻璃窗上凝结成冰花,都是由气相转变为晶体的例子。自然界中此类例子并不多见。

#### 2. 由液相转变为晶体

液相有熔体和溶液两种基本类型。当温度下降到低于熔体的熔点(即过冷却)或当溶液达到过饱和时,可结晶形成晶体。例如,高温熔融态的岩浆,随着温度的降低,可依次结晶出橄榄石、辉石等矿物晶体。盐湖中的溶液因蒸发作用而达到过饱和可结晶出食盐、硼砂等矿物晶体。工业上的各种铸锭和化学药品的制作都是液相转变为晶体的实例。这是自然界和工业上最常见的一种晶体形成方式。

#### 3. 由固相转变为晶体

固相物质有晶态和非晶态两种。对于非晶态的固体,由于其内部质点不具有规则排列的特点,相对于晶体来说其内能较大而处于不稳定状态,因此非晶态的固体可以自发地向内能更小、更稳定的晶体转化。自然界的火山玻璃经过漫长地质年代的演化可以形成细小的长石或石英维晶是最典型的由固相转变为晶体的实例。

除了非晶态的固体可以转变为晶体以外,一些早期形成的晶体,当其所处的物理化学条件改变到一定程度时,原晶体赖以稳定的条件消失,其内部质点就要重新进行排列而形成新的结构,从而使原来的晶体转变成了另外一种晶体。由一种晶体转变为另外一种晶体的方式,主要有以下几种情况。

**同质多相转变** 某种晶体在热力学条件改变时转变为另外一种在新条件下稳定的晶体,新晶体与原晶体成分相同,但结构不同,这就是同质多相转变。例如,在 573℃ 以上  $\text{SiO}_2$  可形成高温  $\beta$ -石英,而在 573℃ 以下高温  $\beta$ -石英可转变为结构不同的低温  $\alpha$ -石英。

**固溶体分解** 固溶体是两种或两种以上的物质在一定的温度条件下形成的类似于溶液的一种均一相的结晶相固体。当温度下降时,固溶体内部物质之间的相容性下降,从而使它们各自结晶形成独立的晶体,这就是固溶体的分离现象。例如,闪锌矿( $\text{ZnS}$ )和黄铜矿( $\text{CuFeS}_2$ )在高温条件下,可按一定比例形成均一相的固溶体,而在低温时就分离成为闪锌矿( $\text{ZnS}$ )和黄铜矿( $\text{CuFeS}_2$ )两种矿物晶体。

**再结晶作用** 再结晶作用是指在温度和压力的影响下,通过质点在固态条件下的扩散,由细粒晶体转变成粗粒晶体的作用。在这一作用过程中,没有新晶体的形成,只是原来晶体的颗粒由小变大。例如,由细粒方解石组成的石灰岩在与岩浆岩接触时,受到热力烘烤作用,细粒方解石结晶成粗粒方解石晶体,石灰岩变质为大理岩。

## 第二节 晶体的层生长与螺旋生长

晶体的生长一般是先生成晶核,尔后再逐渐长大的。晶核的形成是一个复杂的过程。对于从液相中生成晶体的情况而言,通常,当溶液达到过饱和或熔体达到过冷却时,体系内相应组分的质点将按照格子构造形式首先聚合成一些具有一定大小、但实际上是极其微小的微晶粒,这些微小的晶粒便称为晶核或晶芽。晶核是晶体生长的中心。

晶核形成以后,围绕晶核的生长,实际上就是溶液或熔体中的其他质点,按照格子构造规律不断地堆积在晶核上,使晶核逐渐长成晶体的过程。那么质点是如何堆积到晶核上长成晶体的呢?下面重点介绍两个有关的理论模型。

### 1. 层生长理论

层生长(layer growth)理论又称科塞尔-施特兰斯基二维成核(two-dimensional nucleation)理论,是由科塞尔(W. Kossel)提出后经施特兰斯基(I. N. Stranski)发展而

成的晶体生长模型。该理论认为,质点在光滑的晶核表面堆积时,存在着3种不同的占位位置1和2及3(图2-1),分别称为三面凹角、二面凹角和一般位置。每种位置周围分布着数量不等的

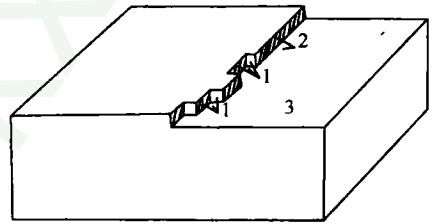


图2-1 层生长模型  
(据潘兆椿等,1993)

质点,这些质点对欲进入该位置的外来质点具有一定的吸引作用。三面凹角周围分布的相邻质点数多于二面凹角,二面凹角周围分布的相邻质点数多于一面位置。这样质点进入3种位置后与周围质点成键的数量多少就不相同。三面凹角周围分布的相邻质点数最多,进入该位置的质点与周围相邻质点之间形成的化学键最多,释放的能量也最大,结构最稳定。因此,质点优先进入三面凹角,其次是二面凹角,最后是一般位置。由此可以推出,在理想情况下,晶体在晶核基础上生长时,应先生长一条行列,然后生长相邻的行列,在长满一层面网后,再开始生长第二层面网,这样晶体面网一层一层地逐渐向外平行推移,最外层的面网便发育成晶体的晶面。这就是层生长理论。

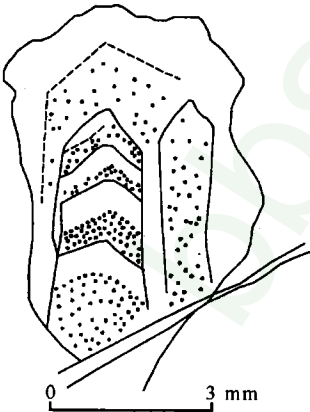


图2-2 石英纵切面上的环带构造  
(据李胜荣等,1996)

晶体表面微形貌的扫描电镜观察表明,实际晶体的生长并不严格按照简单的逐层外推的方式进行。因为在晶体

的生长过程中,常常粘附在晶核表面的不是一个质点,而是按格子构造聚合而成的质点团,其厚度可达几万或几十万个原子层。另外,晶体表面不一定是平坦的晶面,而可能出现晶面阶梯,表明质点向晶核上堆积时也不一定是在一层堆满以后才开始堆积第二层,晶核表面可有多层同时在堆积。

尽管如此,晶体的生长在许多情况下还是按层进行的。例如,晶体断面上常常可以见到环带构造(zoning,图2-2);晶体常生长成为面平、棱直的多面体形态(晶体的自限性);同种物质的晶体上对应晶面间的夹角不变(面角守恒定律);形成生长锥(图2-3)等。所有这些现象都证明了晶体在较理想条件下生长时,晶面是平行向外推移的。

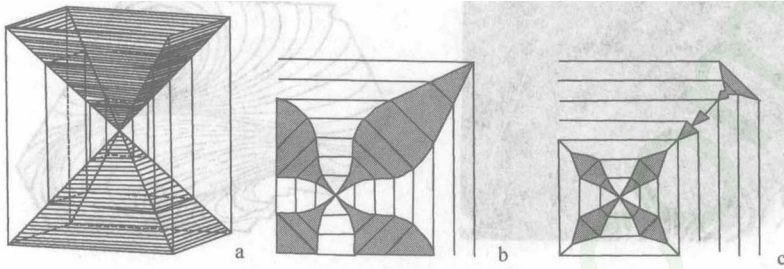


图2-3 晶体的生长锥  
(据南京大学岩矿教研室,1978)

a—各晶面生长速度保持恒定时形成的棱锥状生长锥;b和c—各晶面相对生长速度有变化时形成的复杂生长锥

## 2. 螺旋生长理论

层生长理论虽然较好地阐述了理想条件下晶体的生长机制,但也存在一定的缺陷。因为当晶体的第一层面网生长完成以后,再在其上开始第二层面网生长时,三面凹角和二面凹角已经消失,这时已长好的面网上仅存在一般位置,该位置对溶液中质点的引力较小,质点就不易克服热振动而进入该位置。因此,开始生长第二层面网时需要较高的过冷却度和过饱和度。显然,层生长理论还不能很好地解释低过饱和度和低过冷却度条件下晶体面网的连续生长问题。为此,基于实际晶体结构中常见的位错现象,弗兰克(F. C. Frank)、伯顿(W. K. Burton)和卡夫雷拉(N. Cabrera)等人又提出了晶体的螺旋生长模型,亦称BCF模型。

按照螺旋生长(spiral growth)理论,杂质在晶格中的不均匀分布可使晶格内部产生应力,当应力积累超过一定限度时,晶格便沿某一面网发生相对剪切位移,形成螺旋位错(screw dislocation)。螺旋位错的出现使平滑的界面上出现沿位错线分布的凹角(图2-4),从而使介质中的质点优先向凹角处堆积。显然,随着质点在凹角处的堆积,凹角并不会消失,只是凹角所在的位置随质点的堆积而不断地螺旋式上升,导致生长界面以螺旋层向外推移,并在晶面上留下成长过程中形成的螺旋纹(图2-5)。这便是晶体的螺旋生长。

层生长理论是母相的过饱和度及过冷却度较大而能满足二维成核所需成核能时较适合的

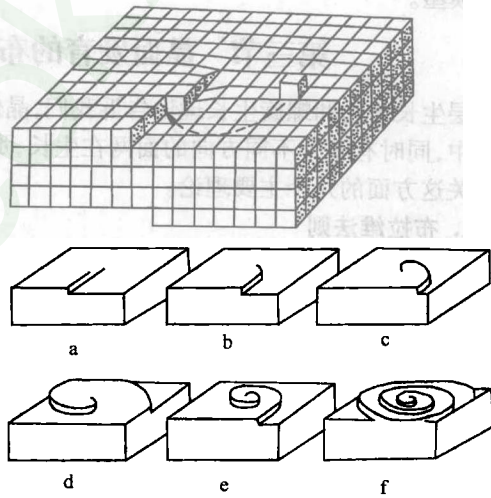


图2-4 晶格中的螺旋位错和螺旋生长模型  
(据潘兆麟等,1993)  
a—f示不同生长阶段

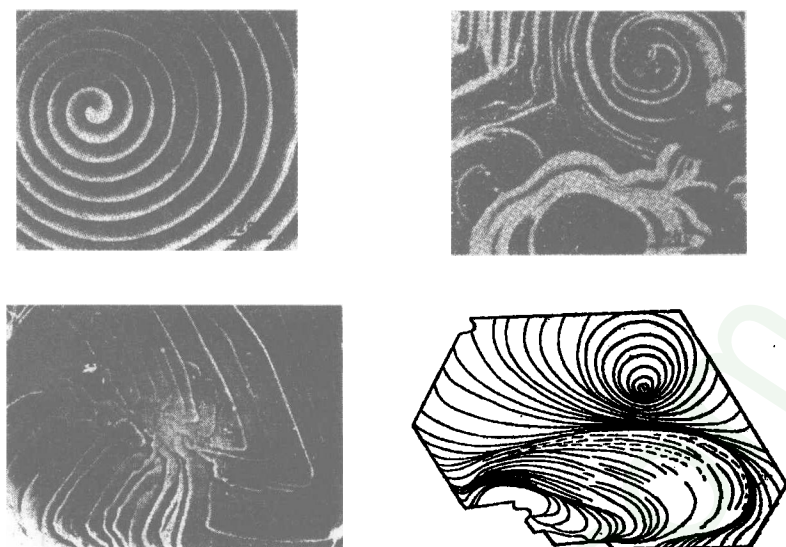


图 2-5 晶面上的螺旋纹  
(据王文魁,2002)

晶体生长模型,螺旋生长理论是解释母相的过饱和度及过冷却度较小甚至很小时较适合的晶体生长模型。

### 第三节 晶面发育的布拉维法则和周期键链理论

层生长理论和螺旋生长理论告诉我们,晶体的晶面都是由面网发育而成的。在晶体的生长过程中,同时有多个不同方向的面网在生长,那么,哪些面网会最终发育成晶面呢?下面我们介绍有关这方面的几个主要理论。

#### 1. 布拉维法则

在了解布拉维法则之前,我们先来分析一下晶面的生长规律。在上一节中我们已经知道,在晶体的生长过程中,晶面是平行向外推移的。在此,我们把晶面在单位时间内沿其法线方向向外推移的距离称为晶面的生长速度。

下面我们来分析一下晶面的生长速度与面网密度之间的关系,图 2-6 为一晶体格子构造的一个切面, $AB$ 、 $BC$  和  $CD$  分别代表 3 个不同方向晶面的迹线。假设 3 个面网的面网密度( $D$ )关系为  $D_{AB} > D_{CD} > D_{BC}$ ,则 3 个面网的面网间距( $d$ )的关系为  $d_{AB} > d_{CD} > d_{BC}$ 。不难理解, $BC$  面网上的质点对 1 位置上的质点引力最强, $CD$  面网上的质点对 2 位置上的质点引力次之, $AB$  面网上的质点对 3 位置上的质点吸引最弱。这就意味着,当晶体生长时,质点优先堆积 1 的位置,其次是 2,最后是 3,显然,面网密度最小的晶面  $BC$  向外推移的速度最快, $CD$  次之, $AB$  最慢。另一方面,由于  $AB$ 、 $BC$  和  $CD$  3 个行列的结点间距  $d_{AB} < d_{CD} < d_{BC}$ ,因此,质点在 3 个行列方向上的堆积速度  $v_{AB} > v_{CD} > v_{BC}$ 。由此可见,虽然  $BC$  面网向外推移生长的速度最快,但沿  $BC$  面网侧向生长的速度却最慢,在晶体的生长过程中,面积将逐渐减小(图 2-6 右)。

综上所述,我们可以得出如下认识:晶面的生长速度与面网密度有关,面网密度越小,晶面生长速度越快;面网密度越大,晶面生长速度越慢。面网密度越小的晶面,在晶体生长过程中,面积逐渐缩小而最终可被面网密度较大的相邻晶面所淹没,因此得以继续扩大的晶面一般都是面网密度较大的晶面。

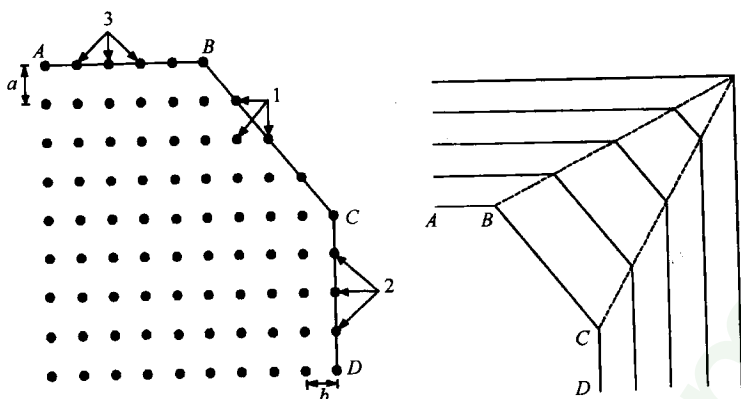


图 2-6 布拉维法则图解  
(据秦善等,2004)

左为面网密度小的晶面优先向外推移;右为生长速度快的晶面在生长时消失

据此,法国结晶学家布拉维(A. Bravais)提出,实际晶体的晶面常常是由晶体格子构造中面网密度大的面网发育而成的。这一结论被称为布拉维法则(law of Bravais)。

应当指出的是,布拉维法则是在仅考虑格子构造的几何因素的情况下推导出来的,并没有考虑环境因素(温度、压力、组分浓度、杂质等)对晶面生长速度的影响。实际上,在晶体的生长过程中,由于受到外界各种因素的影响,各晶面的相对生长速度也在经常发生变化,有的晶面被淹没以后又可以重新生长出来。此外,相对生长速度快的晶面在生长过程中是否消失还取决于晶面间的交角关系(图 2-7),但总的来看,晶面的发育还是符合布拉维法则的。同一物质的各种晶体,通常大者晶面种类少而简单,小者晶面种类多而复杂,在很大程度上就是受布拉维法则制约的。

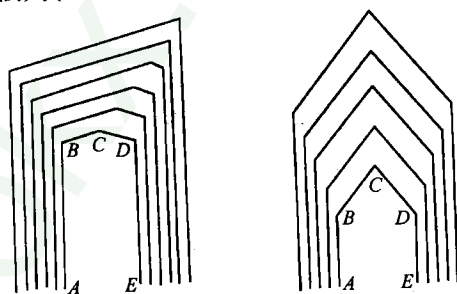


图 2-7 晶面交角和生长速度对晶面发育的约束  
(据南京大学岩矿教研室,1978)

## 2. 周期键链理论

1955 年,哈特曼(P. Hartman)和珀多克(N. G. Perdok)等基于晶体结构的几何特征和质点能量,提出了晶面发育的周期键链理论,即 PBC 理论。

该理论认为,在晶体结构中存在着一系列周期性重复的强键链,其重复规律(周期及方向等)与相应质点的重复规律一致,这样的强键链称为周期键链(periodic bond chain,简称为 PBC)。晶体平行键链生长,键力最强的方向生长最快,平行强键链最多的面最常见于晶体的表面而成为晶面。这就是周期键链理论(PBC theory)。

周期键链理论对晶面发育情况给出了较好的解释。图 2-8 所示的是晶体在生长过程中所有可能出现的晶面,图中箭头指向强键的方向,A,B,C 表示 PBC 的方向。依据晶面与周期键链的关系,晶面类型可划分为以下 3

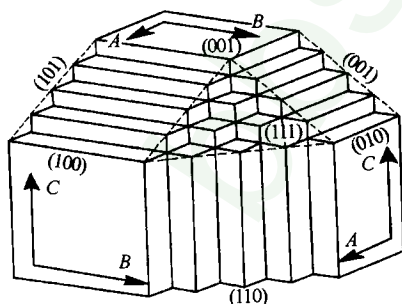


图 2-8 周期键链理论图解  
(据潘兆槽等,1993)

种类型：

F面 又称平坦面,有两个以上的 PBC 与之平行,面网密度最大,质点结合到 F 面上去时,只形成一个强键,晶面生长速度慢,易形成晶体的主要晶面。

S面 或称阶梯面,只有一个 PBC 与之平行,网面密度中等,质点结合到 S 面上去时,形成的强键至少比 F 面多一个,晶面生长速度中等。

K面 或称扭折面,不平行任何 PBC,网面密度小,扭折处的法线方向与 PBC 一致,质点极易从扭折处进入晶格,晶面生长速度快,是易消失的晶面。

从上述分析可以看出,晶体中最常见且发育较大的晶面应当为 F 面,而经常缺失或罕见的应当为 K 面。

布拉维法则和周期键链理论,分别从不同侧面阐明了晶面的生长发育情况,但在实际晶体上发育的一些晶面仍无法用上述两个理论做出完美的解释。

第四节 影响晶体生长的外部因素

晶体生长的形态主要是由晶体内部的结构决定的,因此晶体结构是决定晶体生长形态的内因,但是晶体在生长过程中所处的外界环境条件,也会对晶体的形态产生一定的影响。下面我们对影响晶体生长的几种主要外部因素分析如下。

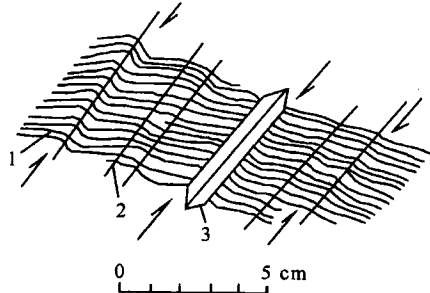


图 2-9 生长介质流动方向对晶体生长的约束 (据陈光远等,1988)

1—层理;2—剪切裂隙;3—磁铁矿

1. 涡流和生长介质的流动方向

在晶体的生长过程中,随着晶体周围溶液中的溶质向晶体上的粘附以及晶体生长释放出来的热量增加,晶体周围的溶液密度减小温度升高而在重力作用下上升,从而使远离晶体的冷的重溶液向晶体方向流动,从而形成涡流。涡流使晶体生长的物质供给不均匀,悬浮在溶液中的晶体下部易得到溶质的供应,而贴着基底的晶体底部得不到溶质的供给,因而造成晶体的形态特征不同。生长介质流动方向对晶体生长的影响与此类似:面对介质来源方向的晶面生长速度快而其相反方向生长较慢(图 2-9)。

2. 温度

在不同的温度条件下,同一种晶体的不同晶面,其相对生长速度会有所改变,从而影响其生

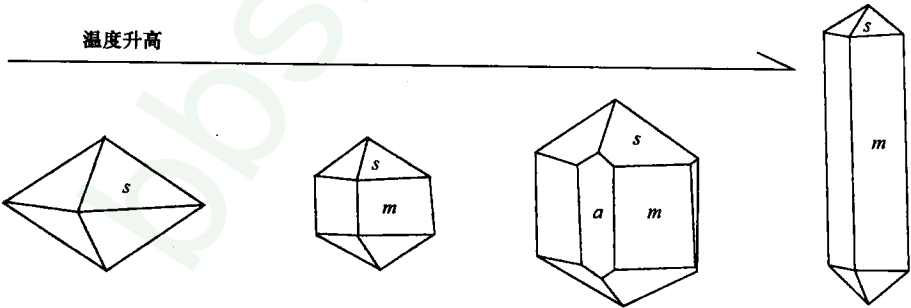


图 2-10 锡石晶体形态与温度关系图解 (据陈光远等,1988)

四方双锥  $s\{111\}$ ; 四方柱  $a\{100\}$ ;  $m\{110\}$

长形态。如方解石( $\text{CaCO}_3$ )在较高温度下常形成扁平状的层解石,而在常温的地表水溶液中多生成细长晶体。许多链状结构矿物如辉锑矿、锡石、角闪石的晶体生长与温度的关系均如此(图2-10)。其成因是高温条件下强键对质点的获取优势不甚明显而低温时则十分突出。

### 3. 杂质与酸碱度

溶液中杂质的存在可以改变晶体上不同面网的表面能,从而使其相对生长速度也随之变化,进而影响晶体的形态。例如,在纯净水中石盐常结晶出立方体晶形,而在溶液中有少量硼酸存在时则出现立方体和八面体聚形。

晶体不同方向面网的性质可以有明显差异,有的适合在碱性条件下生长而有的适合在酸性条件下生长,故溶液的酸碱度也能影响晶体的形态。

### 4. 黏度

在黏度较大的情况下,溶液中质点的供给主要以扩散的方式进行。在这种情况下,晶体上容易接受溶质的棱、角部分生长较快,而晶面的中心部分生长较慢,甚至不生长。许多矿物的树枝状晶和骸晶(图2-11)常常是在高黏度溶液中生成的。

### 5. 结晶速度

结晶速度越快,则形成的结晶中心越多,在围绕多个结晶中心生长的情况下,晶体不易长大,因此形成的晶体多为细粒状。反之,结晶速度越慢,体系中结晶中心的数量越少,越有利于晶体的长大,晶体多呈粗粒状。例如,岩浆在地下深处缓慢结晶时,形成的矿物晶体粗大,如花岗岩中的石英、长石矿物晶体等;同样的岩浆在地表快速结晶时,则形成细粒矿物晶体,如流纹岩中的石英、长石晶体等。

此外,快速生长时晶体也能偏离其平衡态,从而形成骸晶(图2-12)和树枝晶。

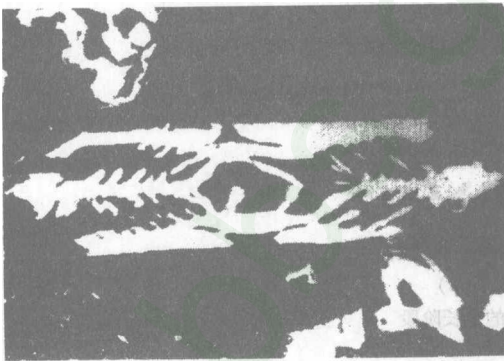


图2-12 玻基玄武岩中橄榄石骸晶的正交偏光显微照片( $10\times 10$ )  
(据路凤香,2001)

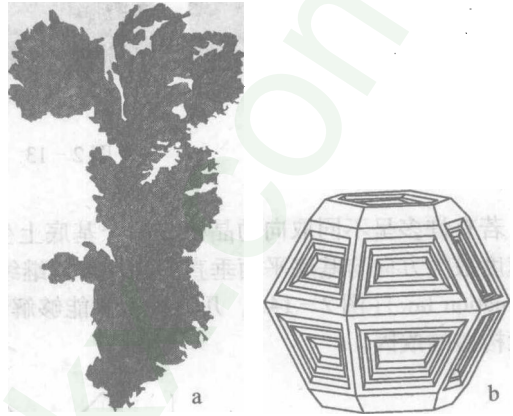


图2-11 自然铜的树枝状晶和自然硫的骸晶  
(a. 中国地质大学(北京)博物馆收藏;  
b. 据陈光远等,1988)

### 6. 生长顺序与生长空间

晶体生长的空间对晶体的生长形态影响较大,早期析出的晶体,具有较多的自由生长空间,晶形完整,自形程度较高;后期析出的晶体,只能在已形成的晶体残留的空间中生长,因此其晶形一般不完整,常呈半自形晶或他形晶。例如,在花岗岩中早期结晶形成的长石晶形自形程度总是高于晚期形成的石英。

### 7. 应力作用

此外,对于在固相中形成的晶体形态而言,外部应力的作用十分重要:一般垂直于压应力轴的晶面较大;在剪切应力作用下形成的晶体可呈不对称椭球状或丝状。这对应力作用方向的判别有重要意义。

## 第五节 晶簇与几何淘汰律

晶簇(druse)是指丛生于岩石空洞或裂隙中某一基底之上,另一端朝向自由空间并具有完好晶形的单晶体群。热液成因的石英、石膏、辉锑矿等矿物常见其晶簇(图2-13)。

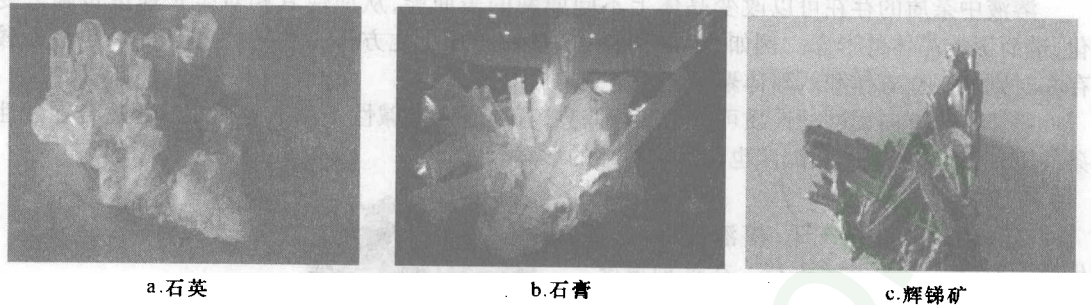


图2-13 矿物晶簇

若有许多呈不同取向的晶核在一个基底上生长,当晶体生长到一定阶段后,就只有那些生长速度最大方向与基底平面垂直的晶体才能继续生长。这就是所谓的“几何淘汰律”(geometric elimination law)(图2-14)。几何淘汰律能够解释晶簇中柱状矿物晶体平行排列和热液矿脉中梳状构造的成因。

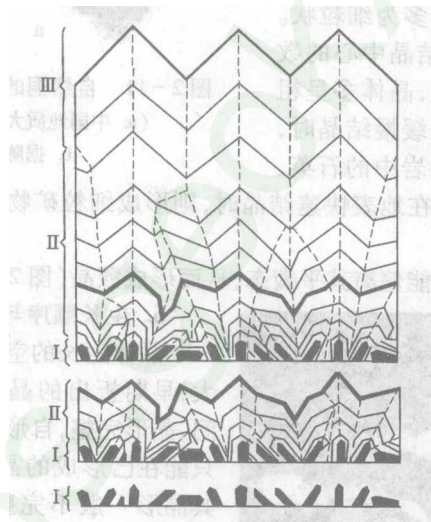


图2-14 几何淘汰率图解

(据陈光远等,1988)

I—III代表矿物的生长阶段

## 第六节 歪晶与面角守恒定律

### 1. 歪晶

从以上几节的分析我们已经知道,晶体的生长形态主要是由其格子构造所决定的,这是决定晶体形态的内因。而且按照布拉维法则,实际晶体的晶面数也是有限的,这些晶面都是面网

密度较大的面网。因此,对于同一种晶体,这些面网密度较大的晶面,在不同的个体中都应该出现。换句话说,也就是对于同一种晶体的不同个体,其晶面数以及晶面的形状、大小应该是相同的。但是,由于晶体在生长过程中不可避免地要受到外界环境因素的影响,致使在同一晶体的不同个体上,本应该出现的一些晶面却没有出现,有时即便是不同个体的对应晶面数目相同,但这些对应晶面的形状和大小也完全不同。这种在外界环境因素影响下形成的偏离理想形态的晶体称为歪晶(distorted crystal)(图2-15)。

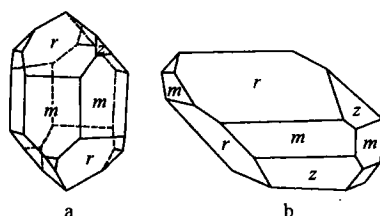


图2-15 石英的理想晶(a)与歪晶(b)

(据潘兆麟等,1993)

斜方柱  $m\{10\bar{1}0\}$ ; 菱面体  $r\{10\bar{1}1\}$ ;  $z\{01\bar{1}1\}$

## 2. 面角守恒定律

同一种晶体不同个体形态上的差别,致使人们在很长的一段时间里,未能掌握晶体形态上的规律性。直到1669年,丹麦学者斯丹诺(N. Steno)在对石英( $\alpha\text{-SiO}_2$ )和赤铁矿( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ )晶体的研究过程中发现,同种晶体的不同个体虽然大小和形态有很大的差别,但它们对应晶面的夹角是守恒的,即同种物质的晶体,其对应晶面之间的夹角恒等。这就是斯丹诺定律(Steno's law)或面角守恒定律(law of constancy of angle)。如图2-15中不同形态的石英,其对应晶面间的夹角是相等的,即  $r \wedge m = 141^\circ 47'$ ,  $r \wedge z = 133^\circ 44'$ ,  $m \wedge m = 120^\circ$ 。

应当指出,晶面夹角与面角是两个不同的概念,所谓面角(interfacial angle)是指晶面法线之间的夹角,其数值等于相应晶面之间实际夹角的补角。实际夹角守恒,面角自然也守恒。在几何结晶学中,通常习惯用面角而不是用晶面的实际夹角来表示晶面之间的关系。

面角守恒的必然性,很容易从晶体的格子构造特征得到阐明。我们知道对于同种物质的晶体,其格子构造形式是相同的,晶体上对应晶面就是晶体格子构造中的对应面网,在晶体的生长过程中,面网都是平行向外推移的。因此,无论晶体长得大小如何,对应晶面之间的夹角总是始终保持恒定不变的。

面角守恒定律是结晶学发展史上的一个重要发现,它为研究复杂多样的晶体形态,提供了一条可行的途径。以此定律为依据,通过对不同形态的晶体进行晶面的测量,将测量结果按照一定的方法投影在平面上,便能绘制出理想的晶体形态图,依此探讨其固有的对称性,从而为几何结晶学的一系列规律的研究奠定了基础。同时,它也为我们通过晶体的测量来研究晶体的种别提供了可能。

## 思考题及习题

- 1) 自然界中晶体生长的途径主要有哪些? 试举例说明。
- 2) 晶体按层生长和螺旋生长机制生长时介质所需要的条件有何不同?
- 3) 矿物晶体按照层生长或螺旋生长机制生长的标志有哪些?
- 4) 晶面发育的布拉维法则和周期键链理论的表述和本质涵义有何异同?
- 5) 试根据晶面发育的理论阐明通常情况下小颗粒的矿物不同晶面数目较多、形态较复杂,而大颗粒的矿物不同晶面的数目较少、形态较简单的原因。
- 6) 影响晶体生长的环境因素有哪些? 进行矿物晶体的成因形态学研究时,是否必须把各种因素放在同等重要的位置上来考查?
- 7) 何为歪晶? 它是如何形成的? 它在矿物成因研究中有何意义?
- 8) 从晶体的格子构造及晶体的生长过程,分析同种晶体相应晶面夹角守恒的必然性。

# 第三章 晶体的测量与投影

## 本章概要

- 1) 晶体的接触测角法、单圈反射测角法和双圈反射测角法。
- 2) 晶体的球面坐标,即方位角  $\varphi$  和极距角  $\rho$ ;投影球及有关概念,即投影球、投影面、基圆、赤平面、大圆、小圆、南极、北极。
- 3) 晶体的球面投影与极射赤平投影;不同晶面的极射赤平投影特点。
- 4) 极式极射赤平投影网与吴氏网;利用吴氏网进行晶体测角的图解计算。

通过上一章我们已经知道,在外界环境因素的影响下,同种物质的晶体,其不同个体的形态和大小千差万别,但其对应晶面之间的夹角是恒等的,这就是面角守恒定律。本章我们将依据此定律,介绍如何对晶体的晶面进行测量,进而对测量数据进行投影,绘制出晶体的理想形态图,从而揭示晶体的固有对称性。晶体的测量和投影是研究晶体形态的一种最基本的方法。

## 第一节 晶体测角

晶体的测角就是利用一定的测量仪器对晶体上相邻晶面的面角进行测量的过程。晶体测角常用的仪器主要有两类,即接触测角仪和反射测角仪。

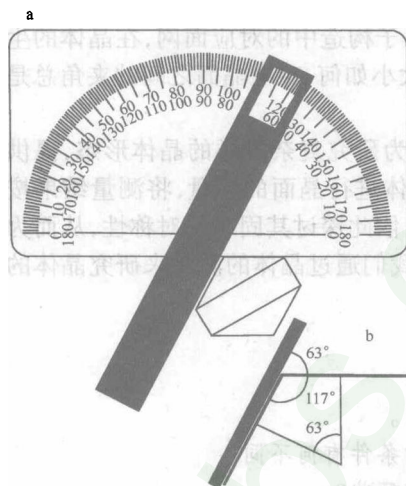


图 3-1 接触测角仪及其测角原理  
(据 W. D. Nesse, 2000)

### 1. 利用接触测角仪测角

接触测角仪 (contact goniometer) 的结构比较简单 (图 3-1), 主要由半圆仪和直臂两部分组成。半圆仪上以  $1^\circ$  为单位, 划分为  $180^\circ$ ; 直臂是固定于半圆仪圆心上且可以自由旋转的一个臂。

利用接触测角仪测量面角时, 首先使半圆仪的底边与晶体的一个晶面靠紧, 然后旋转测角仪的直臂, 使直臂的一边与另一晶面靠紧, 同时保证半圆仪所在的平面与这两个晶面的交棱垂直, 此时在半圆仪上读出的度数即为这两个晶面的面角。此仪器使用简单, 但精度不高 (误差  $1^\circ \sim 0.5^\circ$ ), 且不适合测量小晶体。因此, 在实际操作时, 一般要对同一面角进行多次测量, 最后求其平均值, 作为最终面角值。

### 2. 利用反射测角仪测角

反射测角仪是根据晶面对光线的反射原理制成的, 可分为单圈反射测角仪和双圈反射测角仪两种。

#### (1) 单圈反射测角仪

单圈反射测角仪及其测角原理如图 3-2 所示。利用该仪器进行晶体面角测量时, 首先将晶体用胶蜡固定于刻度盘的中心, 并使欲测晶面的交棱与刻度盘的旋转轴平行。这样, 当光源发出的光线通过光管 C 变成平行光束照射到晶体上某一晶面  $a_1$  时, 光线即发生反射。如果我们旋转刻度盘, 使晶面  $a_1$  的法线正好是光管 C 和观测管 F 交角的平分线时, 根据反射定律, 由晶面  $a_1$  反射来的光线正好被观测管 F 所接收, 此时观测者即可从观测管 F 中看到反射光的光像, 这

时记录下晶面  $a_1$  的法线刻度  $N_1$  (光管 C 与观测管 F 的角平分线刻度值)。然后旋转刻度盘,使由光管 C 发出的光线照射到  $a_2$  晶面上,当在观测管 F 中观察到  $a_2$  晶面的反射光像时,记录下  $a_2$  法线的刻度  $N_2$ ,则  $N_1 - N_2$  的绝对值即为晶面  $a_1$  和  $a_2$  的面角。

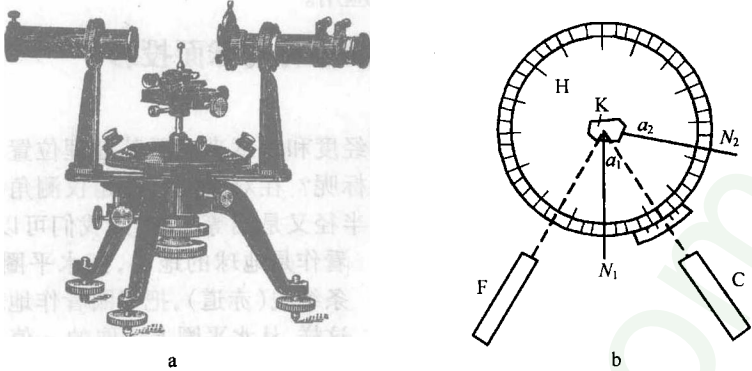


图 3-2 单圈反射测角仪(a)及其测角原理(b)

$a_1, a_2$ —晶面;  $N_1, N_2$ —刻度; C—光管; F—观测管; H—刻度盘; K—待测晶体

单圈测角仪的测量精度较高,可达  $1' \sim 0.5'$ ,但缺点是当晶体固定好以后,只能测量晶体上与刻度盘旋转轴平行的那些晶面之间的面角,若要测量其他与旋转轴不平行的晶面的面角,则必须重新安置一次晶体,因此测量手续比较复杂。

### (2) 双圈反射测角仪

双圈反射测角仪及其测角原理如图 3-3。它与单圈反射测角仪的不同点在于,它具有两个旋转轴相互垂直的圈,一个是绕垂直轴在水平方向上旋转的水平圈,另一个是绕水平轴在竖直平面上旋转的竖圈,由光管发出的光束正好通过这两个旋转轴的交点。在进行晶体测量时,用胶蜡把晶体粘放于两旋转轴交点的晶托上,当从发射管发出的光线照射到某个晶面上时,要使观测镜筒中能观察到该晶面反射光的光像,晶托上的晶体与入射光束之间的角度就需要调整,这个调整是通过旋转水平圈和竖圈实现的,在旋转过程中,当观测镜筒中出现晶面反射光的光像时,即晶面的法线落在发射光管和观测光管轴线的分角线位置时,我们便可以在水平圈上得到一个读数  $\varphi$ ,同时在竖圈上得到另一个读数  $\rho$ 。 $\rho$  和  $\varphi$  值犹如地球上某一点的经度和纬度,它反映了该晶面的法线在晶体空间上的位置。由此可见,通过双圈反射测角仪测量出来的值,不

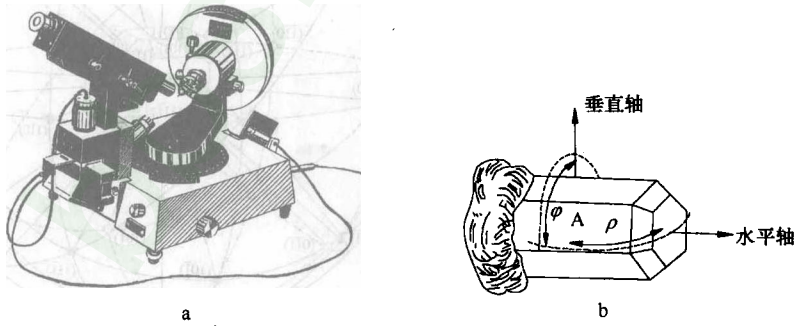


图 3-3 双圈反射测角仪(a)及其测角原理(b)

(据潘兆椿等,1993)

A—晶面;  $\varphi$ —方位角;  $\rho$ —极距角

是晶面的面角,而是某一晶面法线的经纬坐标。我们可以把不同晶面的法线坐标  $\varphi$  和  $\rho$  投影在一个平面上,在投影图上即可计算出任意两个晶面的面角(详见下一节)。显然,除被胶蜡粘结的晶面外,利用双圈反射测角仪,可以把晶体上所有晶面的  $\varphi$  和  $\rho$  都能测量出来,而且精度较高,因此这种仪器在晶体的测量上得到了广泛的应用。

## 第二节 晶体的球面坐标与球面投影

### 1. 晶体的球面坐标

我们知道,地球表面上的任何一点都可以用经度和纬度来表示其地理位置,经度和纬度称为该点的球面坐标。那么,什么是晶体的球面坐标呢?在双圈反射测角仪测角时,晶体置于水平圈和竖圈旋转轴的交点上,而水平圈和竖圈的半径又是相等的,因此我们可以将它们的交点

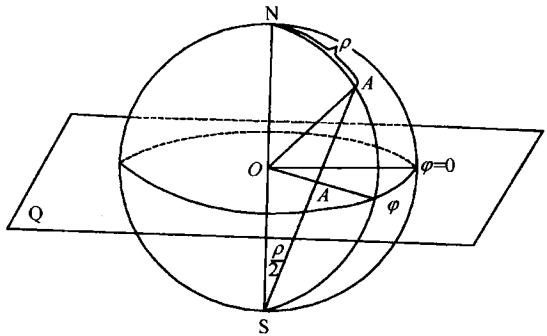


图 3-4 晶面 A 的球面坐标

看作是地球的地心,把水平圈看作地球的一条纬线(赤道),把竖圈看作地球的一条经线。这样,从水平圈上读取的  $\varphi$  值,实际上是包含晶面法线的子午面与零度子午面之间的夹角,即方位角(azimuthal angle;经度),从竖圈上读取的  $\rho$  值实际上是北极与晶面法线之间的夹角,即极距角(polar angle;纬度,只不过该纬度值是以北极为  $0^\circ$  获得的)(图 3-4)。由此可见, $\varphi$  和  $\rho$  实际上是晶面法线与球面交点的坐标。我们把晶面法线与球面交点的方位角  $\varphi$  (经度)和极距角  $\rho$  (纬度)称为该晶面的

球面坐标(spherical coordinate)。显然,晶面的球面坐标反映了该晶面在晶体上的空间方位。因此,在双圈反射测角仪上获得的一对对的数据,正好是各晶面的球面坐标  $\varphi$  和  $\rho$ 。

### 2. 晶体的球面投影

按照习惯,晶体的投影是指对晶体中所有晶面法线的投影。晶体的球面投影就是将晶体中所有晶面法线投影到晶体外的投影球球面上的过程。如图 3-5 所示,在对晶体进行球面投影时,首先将该晶体置于投影球的中心,并使晶体的中心与投影球的球心重合。这时设想从晶体的中心(即球心;注意,不是晶面的几何中心)作各个晶面的法线,并使之延长与晶体外围设想的投影球球面相交,该交点称为各晶面的极点。这些极点就是各晶面在球面上的投影点(图中各点的阿拉伯数字表示的是各晶面的晶面符号,详见以后章节)。各极点在球面上的位置由它们的球面坐标  $\varphi$  和  $\rho$  确定。从图可以看出,晶体上凡是晶棱相互平行的晶面,其球面投影点(极点)都位于同一个大圆(在球面上其球面半径为  $90^\circ$  的圆)上;任意两个晶面的面角(晶面法线之间的夹角)都可以从过这两个晶面极点的大圆(过两晶面极点的平面与球面的交线)上

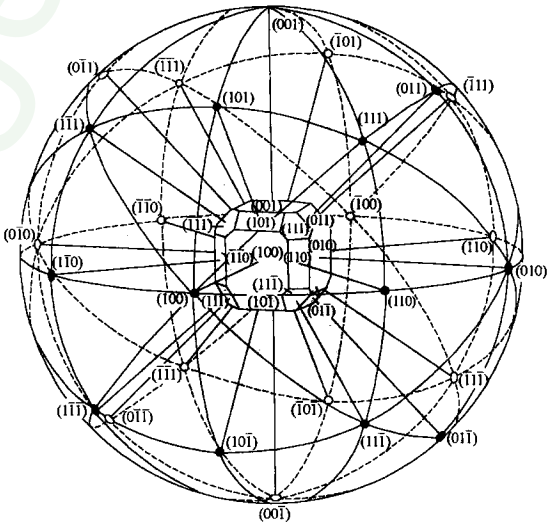


图 3-5 由立方体+八面体+菱形十二面体构成的  
聚形晶的球面投影

两个极点间的弧角得到。

除晶面法线的投影外,晶体投影还涉及其他有关直线(如后续章节中介绍的晶棱、对称轴、晶带轴、双晶轴等)和平面(如对称面、双晶面等)本身的投影。对晶体上直线的球面投影与晶面法线的投影相同,只是在投影时应先将直线平移至投影球球心,直线与球面相交获得两个投影点,通常只取一个即可。对晶体上平面本身的球面投影也需先将平面平移至球心,平面与球面相交所得的大圆便是该平面本身的球面投影。

### 第三节 晶体的极射赤平投影

通过双圈反射测角仪的测角和球面投影,可以获得晶体上任意晶面法线的球面坐标及其在投影球上的空间方位。但是,利用晶体的球面坐标和球面投影,在三维空间来研究晶体的对称性、晶面的分布规律以及计算面角的大小,仍然存在着诸多不便。为了更方便地研究上述问题,就需要把空间分布的各晶面通过投影转化到同一平面上,即把空间问题转化为平面问题。

要实现这种转化可采用的投影方法有多种,其中极射赤平投影法是最常用的方法。

#### 1. 极射赤平投影的原理

通过投影球球心的水平面与投影球球面相交的迹线称为基圆(primitive circle),基圆内的水平面称为赤平面。极射赤平投影(stereographic projection)就是以投影球的S极(南极或下目测点)或N极(北极或上目测点)为观测点,将投影球球面上的点投影到赤平面上的过程,即从S极或N极作球面上点的射线,该射线与赤平面的交点即为球面上点的极射赤平投影点。

晶体的极射赤平投影是通过两次投影实现的:第一步,将晶体上各个晶面的法线(或其他有关直线)投影到球面上(晶体的球面投影);第二步,将球面上的点投影到赤平面上。图3-6给出了由立方体+八面体+菱形十二面体构成的聚形晶的上半球球面投影转化为极射赤平投影的过程。该聚形晶的上半球球面投影点是以S极为观测点进行投影转化到赤平面上的。如欲作与下半球球面投影点相应的极射赤平投影点,必须以N极为观测点,如果仍以S极为观测点进行投影,观察视线与赤平面的交点将位于赤平面之外。一般地,凡是上半球球面上点的极射赤平投影都应以S极为观测点,而凡是下半球球面上点的极射赤平投影则应以N极为观测点。需要指出的是,在极射赤平投影作图时,为了区别上、下半球的极点,由上半球极点投影得来的点在赤平面上用“ $\odot$ ”表示,由下半球极点投影得来的点在赤平面上用“ $\times$ ”表示。如果上半球与下半球的投影点位置恰好重合,则用“ $\oplus$ ”表示。

对球面上的大圆(晶体上平面本身的球面投影)转换为极射赤平投影时,除基圆(即水平面的球面投影)外,只要对位于上半球的半个圆上每点与S极连线就能在赤平面上获得一系列交点,连接这些交点构成以赤平面直径为弦的大圆弧(通常也称大圆),即为球面上大圆的极射赤平投影,亦即晶体上平面本身的极射赤平投影(图3-7)。

#### 2. 晶体极射赤平投影的规律

对比图3-6和图3-7可以看出,晶体的极射赤平投影图具有以下规律:晶体上水平晶面法线的极射赤平投影点位于基圆的中心;直立晶面法线的赤平投影点位于基圆上;倾斜晶面法线的极射赤平投影点位于基圆内,其倾斜度愈大,极射赤平投影点愈靠近基圆。

晶体上有关平面本身的极射赤平投影规律是:与赤平面平行的平面,其极射赤平投影的大圆与基圆重合;垂直于赤平面的平面,其极射赤平投影大圆为基圆的直径;与赤平面斜交的平面,其极射赤平投影大圆为一圆弧,圆弧的弦为赤平面的直径。

以上主要介绍了晶体上有关几何要素直观的极射赤平投影方法。在实际工作中,利用获得的晶体测角数据进行极射赤平投影时,常借助于极式极射赤平投影网和吴氏网来实现。下面介绍这两种投影工具。

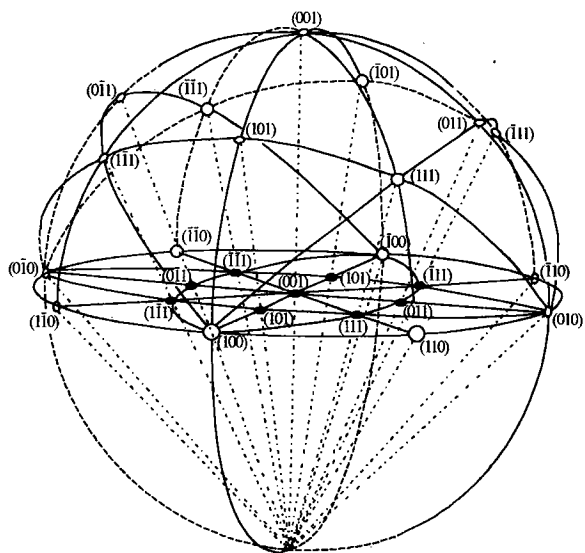


图 3-6 聚形晶的球面投影转化为极射赤平投影图解

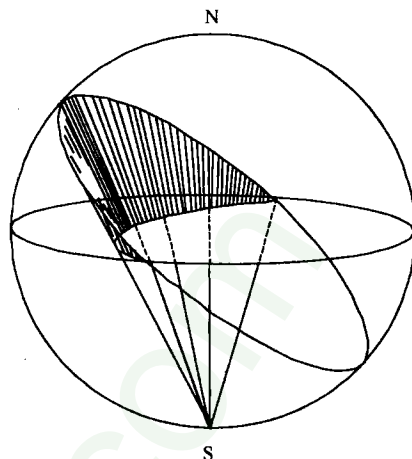


图 3-7 晶体上平面本身的球面投影转化为极射赤平投影图解

#### 第四节 极式极射赤平投影网

我们知道,利用双圈反射测角仪获得的各晶面的测角数据  $\varphi$  和  $\rho$ ,就是各晶面的球面坐标,而各晶面的球面坐标实际上是球面上一条经线和一条纬线的交点坐标。显然,如果把投影球上所用的经线和纬线都投影到赤平面上,就可以根据晶面的球面坐标  $\varphi$  和  $\rho$ ,直接将其在极射赤平投影图上的位置标定出来(图 3-8)。

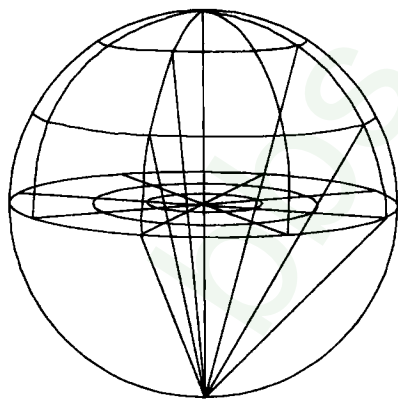


图 3-8 极式网的成网原理

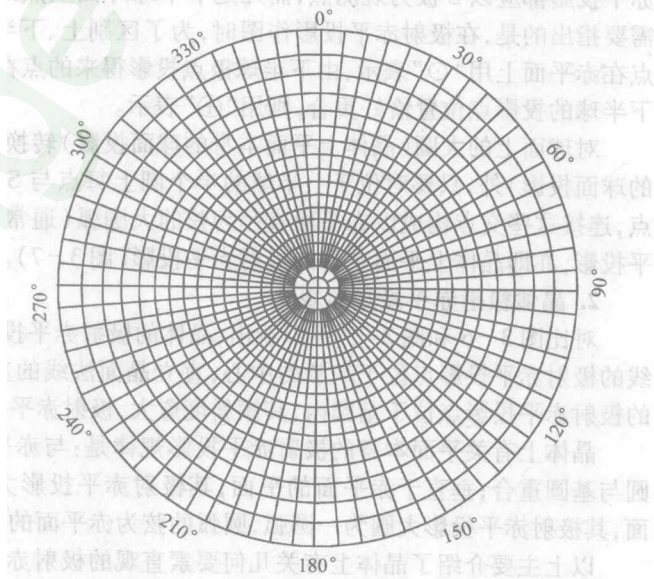


图 3-9 极式极射赤平投影网

极式极射赤平投影网是利用投影球的 S 极为观测点,将投影球上所用的经线和纬线在赤平面上投影后获得的一种投影网。图 3-9 是一张极式极射赤平投影网。其中,基圆的中心是  $\rho = 0^\circ$  的北极投影点,所用的同心圆分别代表以  $5^\circ$  为间隔的纬度线,基圆正好代表的是  $\rho = 90^\circ$  纬度线;放射状直径分别代表以  $5^\circ$  为间隔的经度线。由此可见,晶体上的任何晶面,只要利用双圈反射测角仪获得了其球面坐标  $\varphi$  和  $\rho$ ,通过极式极射赤平投影网,便可以直接找到其在赤平面上的位置,该位置一定是由  $\rho$  确定的同心圆与由  $\varphi$  确定的放射状半径的交点。例如,已知某晶面的球面坐标为  $\rho = 58^\circ, \varphi = 150^\circ$ ,我们可以从基圆中心  $\rho = 0^\circ$  开始,沿半径方向向外找到  $\rho = 58^\circ$  的同心圆,然后,在基圆上从  $\varphi = 0^\circ$  开始,沿顺时针方向找到  $\varphi = 150^\circ$  的那条半径,则两者的交点即为该晶面的极射赤平投影点。值得注意的是,当  $\rho$  大于  $90^\circ$  (其球面投影在南半球),在沿半径向外到达基圆时,要沿半径反向折返,直至找到  $\rho$  所代表的同心圆为止。

## 第五节 吴尔夫网

### 1. 吴尔夫网

吴尔夫网或吴氏网又称赤式极射赤平投影网 (equatorial-type net), 它由俄国学者吴尔夫首创,因而得名。

吴尔夫网是以投影球赤道上任意一点为观察点,以距观察点  $90^\circ$  的大圆平面为投影平面,按照赤平投影方法,对投影球上所有的经圈和纬圈进行投影获得的。吴氏网的投影面是通过球心且垂直于观察点与球心连线即垂直于赤道平面的一个平面。应当指出的是,前面我们介绍的极射赤平投影并不限定必须以赤道平面为投影面,投影观测点也不一定必须为 N 极或 S 极。实际上,任意大圆平面都可以选定为投影平面,而其观察点只要是通过球心且垂直于此大圆平面的垂线与球面的交点即可。由此可见,吴氏网仍属于一种极射赤平投影网,只不过其投影平面不是赤道平面,投影观察点不是两极而已。图 3-10a 为吴氏网的成网原理示意图。

从上述吴氏网的成图原理可以看出,吴氏网的基圆代表的是投影球上与投影平面重合的经圈;吴氏网的南北直径代表的是投影球上与投影平面成  $90^\circ$  的经圈投影;吴氏网上以南北直径为弦的大弧代表的是投影球上所有其他经圈的投影;吴氏网的東西直径代表的是投影球的赤道纬圈投影;以北极为中心的小弧是上半球纬圈投影,以南极为中心的小弧代表下半球纬圈投影(图 3-10b)。

应该指出的是极式极射赤平投影网和吴氏网,都是把球面上的一系列经纬圈投影到投影面上获得的。但对于极式极射赤平投影网中的任意一条网线(同心圆或半径),均是与球面上某一确定  $\rho$  值纬圈和  $\varphi$  值经圈相对应的。对于吴氏网中的网线,虽然它也是由纬圈和经圈投影获得的,然而由于吴氏网在成图时,其投影平面是任意选定的,因此,吴氏网中的任意一条网线都不再具有固定的含义,它们并不确定地代表投影球上某一特定的  $\rho$  值纬圈和  $\varphi$  值经圈。但是,吴氏网中南北方向的直径以及以其为弦的大弧代表投影球的经圈投影,东西直径以及以南、北极为中心的小弧代表的是纬圈投影,这一点是明确的。这是吴氏网和极式极射赤平投影网的本质区别。由于吴氏网中的网线,并不明确地代表某一特定的  $\rho$  值纬圈和  $\varphi$  值经圈,而是具有普遍意义的经圈和纬圈,同时,这些纬圈和经圈的角距、交角在吴氏网上都没有发生变化,这样我们就可以把它作为一种球面坐标量角规,进行球面坐标的赤平投影和晶面间的各种计算。

在晶体的投影中,球面上  $\rho = 0^\circ$  的北极点在赤平面上总是投影在基圆的中心,这种投影与极式极射赤平投影网的方位是完全一致的。但在吴氏网中, $\rho = 0^\circ$  的北极将投影在吴氏网的北极,并不在基圆的中心。显然,晶体的投影方位与吴氏网的投影方位不一致。为了保证利用吴氏网的投影方位与晶体的投影方位一致,就必须对吴氏网的  $\rho = 0^\circ$  点进行调整。对比极式极射赤平投影网和吴氏网可以看出,两者在基圆上的分度是完全相同的,吴氏网中两条直径的分度,与极式极射赤平投影网中的任意一条直径是完全一致的。因此,我们可以把吴氏网的基圆中心规定

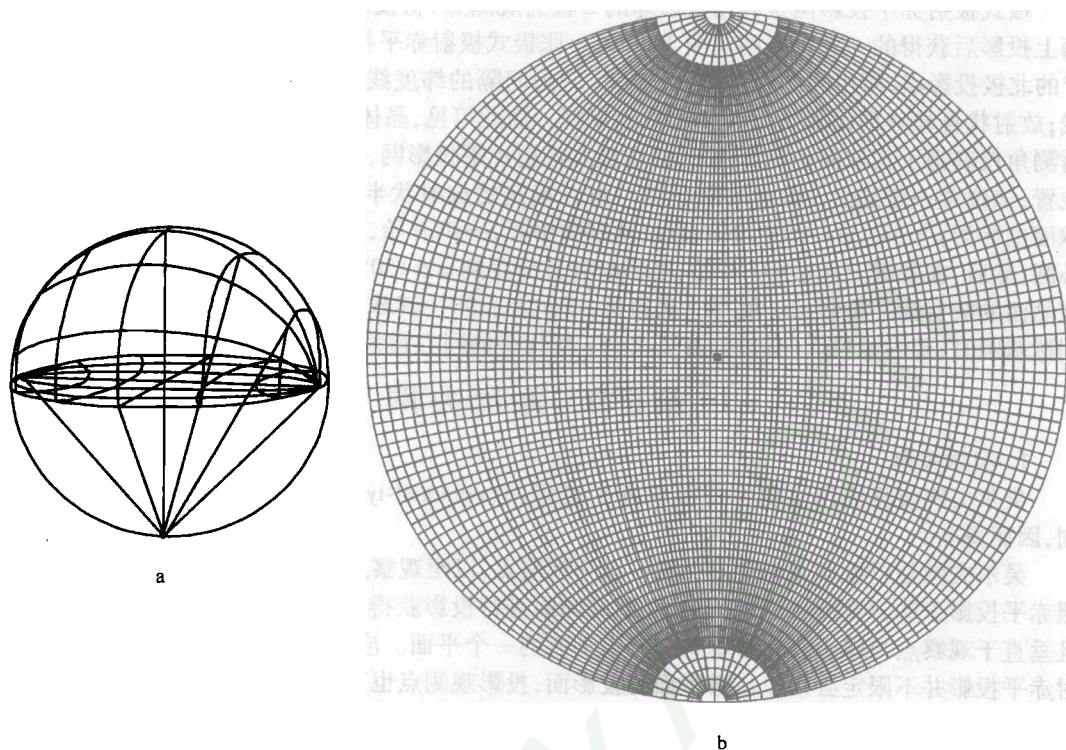


图 3-10 吴尔夫网的成网原理(a)及吴尔夫网(b)  
(据 Wulff, 1893)

为  $\rho = 0^\circ$  的北极投影点, 用吴氏网的直径度量  $\rho$ , 把吴氏网南北直径上端与基圆的交点规定为  $\varphi = 0^\circ$ , 用基圆刻度度量  $\varphi$ , 这样吴氏网就具有了与极式极射赤平投影网同样的效用。

下面我们通过一个实例来说明如何利用吴氏网进行球面坐标的赤平投影。已知某一晶面  $M$  的球面坐标为:  $\rho = 66^\circ$ ,  $\varphi = 120^\circ$ 。投影时, 首先用一张透明纸蒙在吴氏网上, 描出基圆、基圆中心及  $\varphi = 0^\circ$  的点。然后, 以  $\varphi = 0^\circ$  为起点, 在基圆上顺时针方向找到并在透明纸上标出  $120^\circ$  点。这时, 若将基圆中心与该点相连, 其连线一定是球面上  $\varphi = 120^\circ$  的经线的投影, 即晶面  $M$  的投影点一定位于该半径上。由于在吴氏网中没有这样现成的半径, 我们可以使透明纸绕基圆中心旋转, 使透明纸上  $\varphi = 120^\circ$  点落在吴氏网的任意直径的一端之上。此时, 从基圆中心沿此直径方向向外数  $66^\circ$ , 即得到  $\rho = 66^\circ$  同心圆与  $\varphi = 120^\circ$  半径的交点, 将该点标在透明纸上便是  $M$  的赤平投影点(图 3-11)。

显然, 借助于旋转透明纸, 吴氏网完全可以起到极式极射投影网的作用。另外, 吴氏网还具有很多极式网所不具有的其他方面的效用, 因而在各种极射赤平投影的图解分析计算工作中, 应用最多的还是吴氏网。

## 2. 吴氏网的应用

在吴氏网的应用实例分析之前, 我们首先介绍一下利用吴氏网进行图解计算时需注意的几个问题。

1) 极射赤平投影的图解计算工作, 是以透明纸蒙在吴氏网上进行各种操作完成的。开始操作之前, 首先要在透明纸上描画出投影基圆及其中心, 投影中心用“+”标出。同时, 标出基圆的北极和南极, 用“N”和“S”表示, 以及在基圆上选定一点, 作为方位角  $\varphi = 0^\circ$  的基准, 为了与构造

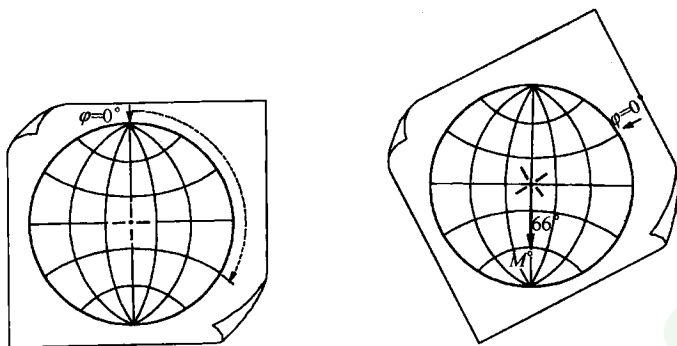


图 3-11 利用吴尔夫网在透明纸上标定已知球面坐标的晶面法线投影位置

地质学上的方位取得一致,该点可选在 N 点的位置。

2) 标准的吴氏网,其基圆直径为 20 cm,网线的分度是  $2^\circ$ ,但在两极附近,大圆弧线的间隔为  $10^\circ$ 。作图时的精度一般要达到  $0.5^\circ$ ;当投影点不是正好落在网线上时,其位置应在网线间按插入法估计确定。

3) 位于投影球上、下半球的点,它们的极射赤平投影点分别以  $\odot$  和  $\times$  表示。 $\odot$  的中心和  $\times$  的交点,应精确地落在投影位置上。

4) 在进行图解计算过程中,经常需要对蒙在吴氏网上的透明纸进行旋转操作,在旋转透明纸的过程中,必须保证使透明纸的基圆中心与吴氏网的中心重合,同时两者的基圆也始终重合。

5) 作图时一般均以削尖的 3H 铅笔徒手描绘,而不借助于圆规和直尺。

下面我们通过几个例子说明吴氏网的应用。

**应用 1** 根据晶体测量数据,进行晶面的极射赤平投影

**实例 1** 已知某一晶面  $M$  的球面坐标为  $\rho = 120^\circ$ ,  $\varphi = 256^\circ$ ,求作其赤平投影点。

有关已知某一晶面的球面坐标,利用吴氏网求作其赤平投影点的过程,前面我们已经介绍过,这个实例请读者完成。

**应用 2** 根据晶体测量数据,求解晶面的面角

**实例 2** 已知两晶面  $M$  和  $P$  的球面坐标为  $\rho_M = 68^\circ$ ,  $\varphi_M = 256^\circ$ ;  $\rho_P = 20^\circ$ ,  $\varphi_P = 46^\circ$ ,求此二晶面的面角。

**分析:** 晶面的面角是指两晶面法线的夹角,晶面的球面坐标又是晶面法线与球面交点的坐标,因此两晶面的面角应当是  $M$  和  $P$  确定的大圆上  $M$  和  $P$  之间的弧角(图 3-12a)。

其求解过程如下,首先根据两晶面的球面坐标将其投影在赤平面上,然后,保持透明纸上基圆的中心和吴氏网的中心重合,旋转透明纸,使  $M$  和  $P$  点落于吴氏网的一条大圆弧上,在大圆弧上读出  $M$  和  $P$  点间的刻度值,即为该两晶面的面角(图 3-12b)。显然,利用吴氏网我们可以求得晶体上任意两个晶面的面角。

**应用 3** 求解球面上大圆的极点

**实例 3** 已知  $R$  为由球面上两点  $M$  和  $P$  确定的一个大圆, $M$  和  $P$  的球面坐标分别为  $\rho_M = 68^\circ$ ,  $\varphi_M = 256^\circ$ ;  $\rho_P = 20^\circ$ ,  $\varphi_P = 46^\circ$ ,求大圆  $R$  的极点坐标。

**分析:** 大圆的极点是指通过该大圆的圆心且垂直该大圆平面的直径与球面的交点。

求解过程如下:首先根据  $M$  和  $P$  的球面坐标,求出由它们确定的大圆  $R$ (步骤同实例 2),然后在吴氏网的直径上量出  $90^\circ$  后标点,则该点即为大圆  $R$  的极点。

**应用 4** 求解球面上两个大圆的夹角

**实例 4** 已知大圆  $A$  是由  $M$  和  $P$  点确定的一个大圆, $M$  和  $P$  点的球面坐标为  $\rho_M = 76^\circ$ ,  $\varphi_M =$

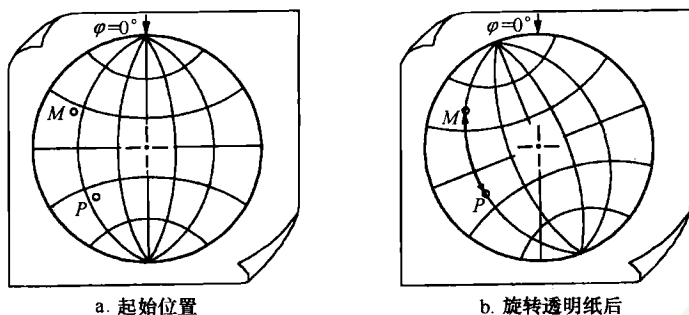


图 3-12 利用吴尔夫网求解两晶面  $M$  和  $P$  的面角

$210^\circ, \rho_P = 45^\circ, \varphi_P = 330^\circ$ ; 大圆  $B$  是由  $T$  和  $R$  点确定的大圆,  $T$  和  $R$  点的球面坐标为  $\rho_T = 50^\circ, \varphi_T = 130^\circ, \rho_R = 55^\circ, \varphi_R = 44^\circ$ , 求这两个大圆的交角。

分析: 两个大圆的夹角, 实际上是两个大圆极点之间的夹角, 即由两个基点确定的大圆上, 两极点之间的弧角。

求解过程: 首先依据  $M, P$  点和  $T, R$  点的球面坐标, 求解两个大圆  $A$  和  $B$ , 方法步骤同实例 2。在此基础上, 求解大圆  $A$  和  $B$  的极点  $C$  和  $D$ , 方法步骤同实例 3, 最后将极点  $C$  和  $D$ , 通过旋转透明纸, 放在同一大圆弧上, 则在该大圆弧上  $C$  和  $D$  点之间的弧角, 即为大圆  $A$  和  $B$  的夹角。

有关利用吴氏网的图解计算还有很多, 这里不再赘述。

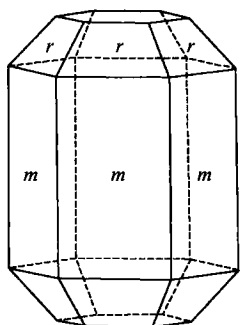


图 3-13 磷灰石晶体形态

### 思考题及习题

- 1) 已知某一晶面  $M$  的球面坐标为  $\rho = 120^\circ, \varphi = 256^\circ$ , 求作其赤平投影点。
- 2) 已知磷灰石晶体 (图 3-13) 上,  $m \wedge m = 60^\circ, m \wedge r = 40^\circ$ , 求作其所有晶面的投影, 并在投影图中求  $r \wedge r$ 。
- 3) 晶体上一对相互平行的晶面在极射赤平投影图上表现为什么关系?
- 4) 请完成实例 3 和实例 4。

## 第四章 晶体的外部对称

### 本章概要

- 1) 对称概念、晶体对称特点。
- 2) 晶体外部对称要素的种类及相应的对称操作;晶体对称定律;晶体对称要素组合定理;对称型。
- 3) 晶体对称分类方案。

一切晶体都具有对称性,这是由晶体的基本性质所决定的。但任何晶体的对称又都是有限的,受到晶体对称定律的约束,且对于不同的晶体而言,其对称性又互有差异,因此对称性成为晶体分类的依据。晶体的对称不同于其他物质的对称,它不仅反映了晶体在几何学上的对称,还反映了晶体在物理学和化学方面的对称。所以,晶体对称性的学习和掌握,是理解晶体一系列性质,以及鉴定、识别和利用晶体的“敲门砖”。晶体对称性是结晶学的核心内容。

晶体有外部形态对称和内部结构对称。前者是后者外在的宏观的表现,是本章介绍的内容。后者尚有一些特有的性质,将在以后的章节中讨论。

### 第一节 晶体对称的概念与特点

#### 1. 对称的概念

对称(symmetry)是指物体或图形中相同部分之间有规律地重复。对称现象在自然界和人类生活中都很常见。五彩斑斓的植物花冠、光怪陆离的动物形体、庄严肃穆的天安门城楼、小巧玲珑的锅碗瓢盆以及炎炎夏日送人清凉的风扇等,都以不同形式呈现了自身的对称美。

图4-1中的建筑物左右两边是对称的,左右两边的相同部分是通过中央假想的直立镜面反映其彼此是重合的;图4-2中的花朵是对称的,花瓣是花的相同部分围绕通过花心的花枝的旋转,花瓣得以重复。



图4-1 建筑物左右对称

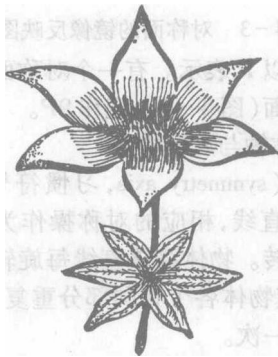


图4-2 花的旋转对称

(据潘兆橹等,1993)

晶体的外部对称是其几何形态的对称,具体地表现为晶体的晶面、晶棱和角顶等的有规律地重复。

#### 2. 晶体对称的特点

尽管许多物体都有对称性,但晶体的对称在成因上与其他物体有明显区别。生物的对称主

要受适者生存规律的制约,建筑物和日用品的对称则受人们的审美观及对其用途的要求制约,而晶体的对称则取决于其内部质点的周期性平移重复规律。因此,晶体的对称具有如下特点:

1) 所有晶体都具有对称性。按照晶体的定义,通过平移这种特殊的对称操作,可使晶体内部相同质点作周期性重复,因此对称性是晶体概念中的应有之意。

2) 晶体的对称是有限的。按照晶体对称定律(见本章下文),只有符合格子构造规律的对称才能在晶体上出现。

3) 晶体的对称不仅具几何意义,也具有物理和化学意义。因为晶体的对称既体现在外形上,也体现在各种物理性质(如光学、力学、热学、电学性质等)和化学组成方面。

## 第二节 晶体外部对称要素与对称定律

### 1. 对称要素与对称操作

要研究晶体相同部分的重复规律,必须借助于一些几何图形(点、线、面),通过一定的操作来实现。这些几何图形称为对称要素(symmetry elements),这种操作就叫做对称操作(symmetry operation)。

晶体外部几何形态(晶面、晶棱和角顶等)可能存在的对称要素和相应的对称操作如下。

#### (1) 对称面与反映操作

对称面(symmetry plane,习惯符号 $P$ )是一假想的平面,亦称镜面(mirror),相应的对称操作为此平面的反映。对称面的作用犹如一面镜子,它将图形平分成为互为镜像的两个相等部分,分别相当于物体和像。

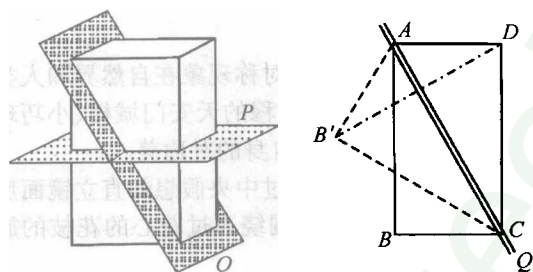


图 4-3 对称面的镜像反映图解

在图 4-3 中平面 $P$ 是对称面,但平面 $Q$ 则不是对称面。因为平面 $Q$ 虽然把图形 $ABCD$ 平分为两个等大且等形的三角形 $\triangle ADC = \triangle ABC$ ,但这两者并非互为镜像, $\triangle ADC$ 的镜像是 $\triangle AB'C$ 。

一个晶体不一定具有对称面,也可以不止一个对称面,但最多不超过 9 个。

晶体上的对称面可能出露于垂直平分晶面、垂直晶棱并通过晶棱中点及包含晶棱等 3 种位置。

对称面以 $P$ 表示。有一个对称面记作 $P$ ,有多个对称面时,数字写在 $P$ 的前面,如立方体具有 9 个对称面(图 4-4),记作 $9P$ 。

#### (2) 对称轴与旋转操作

对称轴(symmetry axis,习惯符号 $L^n$ )是一假想的直线,相应的对称操作为围绕此直线的旋转。物体绕该直线每旋转一定角度后,可使物体各个相同部分重复,即整个物体重复一次。

物体旋转一周重复的次数称为轴次 $n$ 。每次重复时所旋转的最小角度称基转角 $\alpha$ 。两者之间的关系为 $n = 360^\circ/\alpha$ 。由于任一物体旋转一周后必然重复,因此,轴次 $n$ 必为正整数,基转角 $\alpha$ 必须要能整除 $360^\circ$ 。

对称轴以 $L$ 表示,轴次 $n$ 写在 $L$ 的右上角,写作 $L^n$ 。有多个 $L^n$ 存在时,数字写在前面,如 $3L^4$ 。

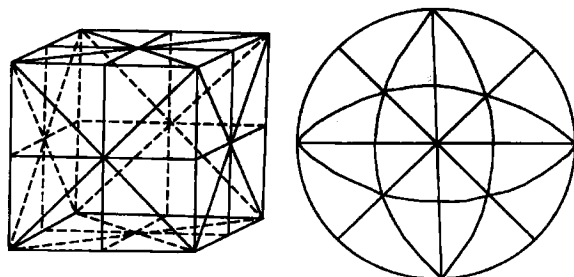


图 4-4 立方体的 9 个对称面及其极射赤平投影

表 4-1 晶体外形上各种对称轴及旋转反伸轴的符号及作图符号

对称轴类型	习惯符号	基转角	投影图符号	对称轴类型	习惯符号	基转角	投影图符号
一次对称轴	$L^1$	$360^\circ$		六次对称轴	$L^6$	$60^\circ$	●
二次对称轴	$L^2$	$180^\circ$	●	四次旋转反伸轴	$L_i^4$	$90^\circ$	□
三次对称轴	$L^3$	$120^\circ$	▲	六次旋转反伸轴	$L_i^6$	$60^\circ$	○
四次对称轴	$L^4$	$90^\circ$	■				

晶体外形上可能出现的对称轴见表 4-1。

轴次  $n > 2$  的对称轴,称高次轴,轴次  $n \leq 2$  的称低次轴。

在一个晶体中,除  $L^1$  必然存在外,等于或大于 2 次的对称轴可以没有,也可以有一种(同一轴次)或多种,而同一轴次的可以有一个也可有多个。多种对称轴同时出现时,书写时按高次轴到低次轴依次排列,如  $3L^4 4L^3 6L^2$ 。

对称轴在晶体上可能出露于晶面中心、晶棱中心或晶体角顶(图 4-5)。

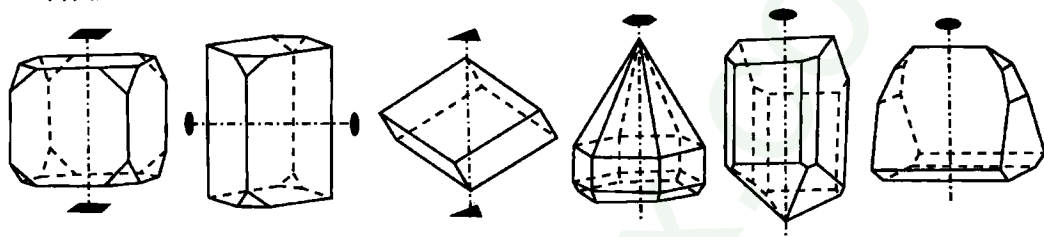


图 4-5 晶体上对称轴出露位置  
(据罗谷风,1985)

### (3) 对称心与反伸操作

对称心(center of symmetry, 习惯符号  $C$ ) 是一假想的点,相应的对称操作为对该点的反伸。通过物体的对称心作任意直线,在此直线上位于对称心两侧且与对称心等距离的两点处,必定可以找到性质完全相同的对应点。

图 4-6 是一个具有对称心的图形, $C$  点为对称心。在通过  $C$  点所作的直线上,距  $C$  等距离的两端可以找到对应点,如  $A$  和  $A_1$ 、 $B$  和  $B_1$ ;若取图形中任意一点  $A$  与对称心  $C$  作连线,再由  $C$  点向相反方向延伸等距离,必然能找到对应点  $A_1$ 。

任何一个具有对称心的图形中,其相对应的面、棱、角都体现为反向平行。图 4-7 中  $C$  为对称心, $\triangle ABD$  与  $\triangle A_1 B_1 D_1$  为反向平行。

若晶体中存在对称心,其晶面必然成对分布,两两平行,同形等大且方向相反(图 4-8)。这是理想晶体有无对称心的判别依据。

### (4) 旋转反伸轴与旋转加反伸操作

旋转反伸轴(rotoinversion axis, 习惯符号为  $L_i^n$ ),或倒转轴,是假想的一条直线和直线上的一個定点。如果物体绕该直线旋转一定角度后,再对此直线上的定点进行反伸,可使相同部分重复,即所对应的操作是旋转 + 反伸的复合操作。

以  $L_i^4$  为例说明其对称含义和操作过程。图 4-9a 绘出的几何多面体  $ABCD$  称四方四面体,它由  $ABC$ 、 $BDC$ 、 $ABD$  和  $ACD$  4 个等腰三角形面所组成,其极射赤平投影见图 4-9d,其中小黑点代表上半球晶面投影点,小圆圈代表下半球晶面投影点。其对称操作步骤:①按  $L_i^4$  基转角旋转,四方四面体  $ABCD$  围绕  $L_i^4$  旋转  $90^\circ$  到达四方四面体  $A'B'C'D'$  的位置;此时  $A'B'C'D'$  与  $ABCD$  两个四方四面体不重复(图 4-9b);②对定点的反伸(其操作相当于对称心的作用,但该定点只是

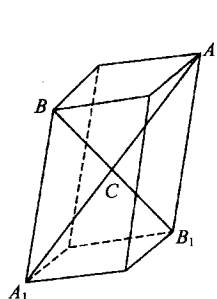


图 4-6 对称心图解  
(据潘兆槽等,1993)

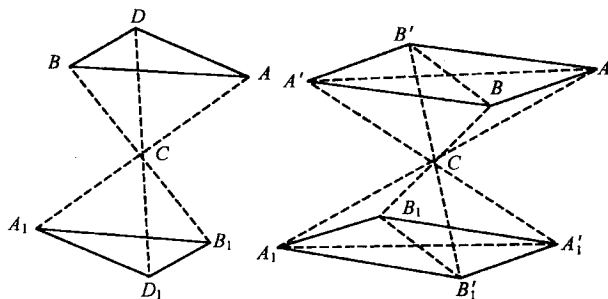


图 4-7 由对称心联系起来的两个  
反向平行的图形  
(据潘兆槽等,1993)

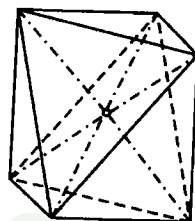


图 4-8 具对称心晶体的  
晶面特征  
(据罗谷风,1985)

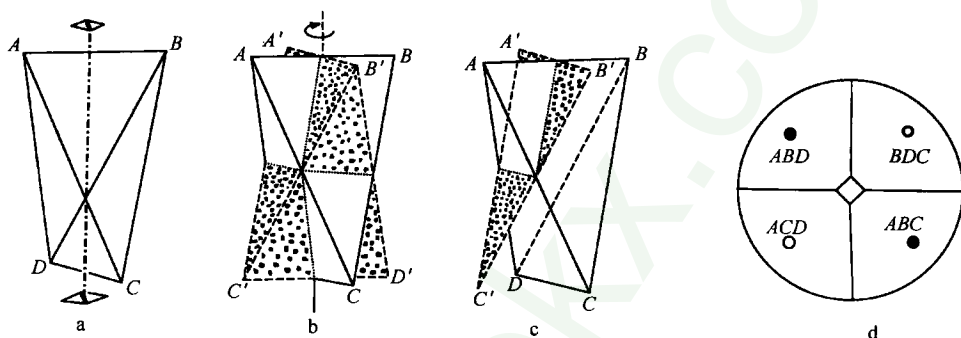


图 4-9 具  $L_4^4$  的四方四面体(a)、相应的对称操作(b和c)和赤平投影(d)

四方四面体的几何中心而非对称心),经过四方四面体中心点的反伸  $A'B'C'D'$  与  $ABCD$  两个四方四面体重复,具体如三角形  $A'B'C'$  的  $A'$  反伸到  $C$ ,  $B'$  反伸到  $D$ ,  $C'$  反伸到  $B$ ,三角形  $A'B'C'$  和  $CDB$  重合,同理,反伸后  $A'C'D'$  与  $CBA$ ,  $A'B'D'$  与  $CDA$ ,  $D'C'B'$  与  $ABD$  重合,即四方四面体经过先旋转,再反伸两个对称操作后,整个图形复原。

$L_4^1, L_4^2, L_4^3, L_4^4, L_4^6$  旋转反伸轴的作用及其与简单对称要素的关系见图 4-10。

由图 4-10 可以看出:除  $L_4^4$  外,其余各种旋转反伸轴都可以用其他简单的对称要素或它们的组合来代替,其间关系如下:  $L_4^1 = C$ ;  $L_4^2 = P$ ;  $L_4^3 = L^3 + C$ ;  $L_4^6 = L^3 + P_{\perp}$ 。鉴于  $L_4^4$  不能被其他简单对称要素代替而构成一种独立的对称要素,  $L_4^6$  虽与  $L^3 + P_{\perp}$  等效,但它在晶体的对称分类中有特殊意义(当晶体中有  $L^3 + P_{\perp}$  时,二者由  $L_4^6$  替代,晶体为六方晶系而不是三方晶系,见表 4-2),因此通常只保留  $L_4^4$  和  $L_4^6$ 。

应注意,  $L_4^4$  内总包含一个与它重合的  $L^2$ 。  $L_4^4$  含有  $L^2$  的对称操作的作用,但  $L^2$  没有  $L_4^4$  的作用,故  $L^2$  不能替代  $L_4^4$ 。当一个晶体没有对称心且有  $L^2$  时,此  $L^2$  很可能是  $L_4^4$ ,但并非必定是  $L_4^4$ ;若确为  $L_4^4$ ,此时  $L^2$  被包含在  $L_4^4$  之内不再独立存在。

晶体的对称要素还有旋转反映轴或映转轴 (rotoreflexion axis, 习惯符号  $L_n^s$ ),是假想的一条直线和垂直于该线的一个平面,相应的对称操作为围绕此直线旋转一定角度加对此平面的反映。除  $L_4^s = L_4^4$  外,其他  $L_n^s$  都可用简单对称要素或它们的组合代替,此不赘述。

## 2. 晶体对称定律

晶体对称定律 (law of crystal symmetry) 是指晶体中可能出现的对称轴、旋转反伸轴和旋转反

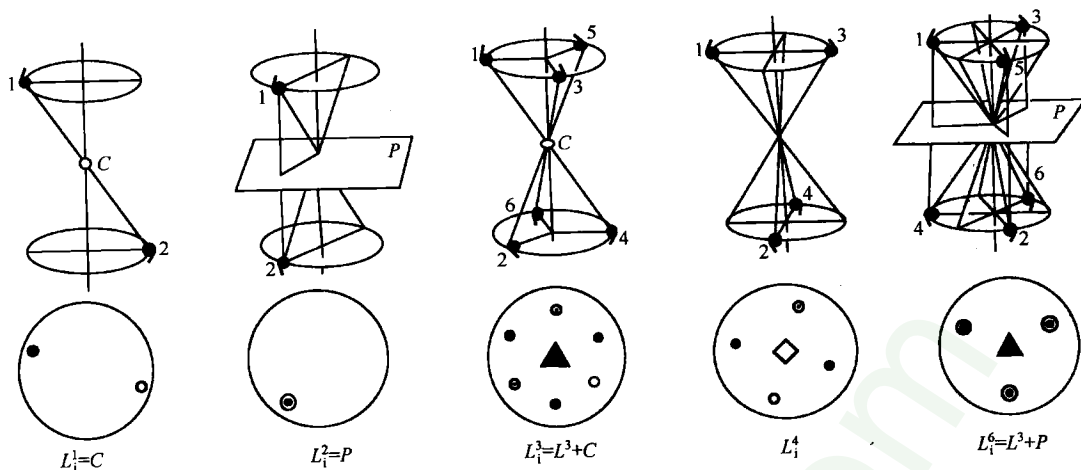


图 4-10 各种旋转反伸轴及其与简单对称要素的关系  
(据潘兆璜等,1993)

映轴的轴次只能是一次、二次、三次、四次和六次,或者说不可能存在五次及高于六次的对称轴、旋转反伸轴和旋转反映轴。

在晶体结构中,垂直对称轴一定有面网存在,在这样的面网上,结点分布所形成的网孔一定要符合与对称轴相适应的对称规律。围绕  $L^2, L^3, L^4, L^6$  所形成的网孔应分别为长方形、等边三角形、正方形和正六边形,这些多边形网孔应能毫无间隙地布满整个面网,从能量上看是稳定的(图 4-11);若存在  $L^5$  和高于六次的对称轴,则围绕  $L^5$  应形成正五边形网孔,围绕高于六次的轴将形成相应的正多边形网孔,如正七边形、正八边形等,而这些正多边形网孔都不能毫无间隙地布满整个面网,从能量上看是不稳定的(图 4-11)。所以,在晶体中不可能存在五次及高于六次的对称轴。对于旋转反伸轴和旋转反映轴,其情况与此类似。

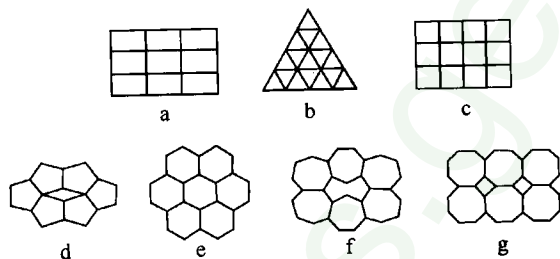


图 4-11 晶体对称定律图解

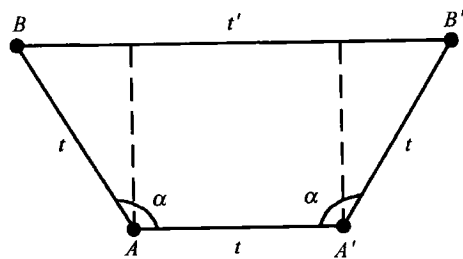


图 4-12 晶体对称定律的数学证明

晶体的对称定律还可以用数学方法加以证明:

对两个间距为平移单位  $t$  的结点  $A$  和  $A'$ (图 4-12)进行旋转操作  $R$  和相应的逆操作  $R^{-1}$ ,使  $AA'$  旋转  $\alpha$  角得到两个新的结点  $B$  和  $B'$ ,  $BB'$  平行于  $AA'$ ,  $BB'$  之间的距离  $t'$  必定是平移单位  $t$  的整数倍,即  $t' = mt$ ,此处  $m$  为某一整数。从图中又可得到

$$t' = 2t \sin(\alpha - 90^\circ) + t \quad (4-1)$$

即

将  $t' = mt$  代入(4-1)式:

得

$$\cos \alpha = (1 - m)/2$$

即

$$-2 \leq (1-m) \leq 2$$

(4-2)

满足不等式(4-2)的  $m$  值为

$$m = -1, 0, 1, 2, 3$$

相应的  $\alpha$  值为:  $\alpha = 0$  或  $2\pi, \pi/3, \pi/2, 2\pi/3, \pi$ 。

这就证明了轴次  $n$  只能为 1, 2, 3, 4, 6。

### 3. 对称要素的极射赤平投影

#### (1) 对称面的投影

在球面投影时对称面与球面相交为大圆,故其极射赤平投影相当于球面大圆的投影。水平对称面投影为基圆;直立对称面投影为基圆的直径;倾斜对称面投影为以基圆直径为弦的大圆弧。

#### (2) 对称轴和旋转反伸轴的投影

相当于极射赤平投影中晶面法线的投影。直立的对称轴和旋转反伸轴投影在基圆中心;水平的对称轴和旋转反伸轴投影在基圆上;倾斜的对称轴和旋转反伸轴投影在基圆内。它们在极射赤平投影图上用表 4-1 中的特殊符号进行标记。

#### (3) 对称心的投影

在基圆中心标出  $C$  即可。

图 4-13 是立方体的全部对称要素  $3L^4 4L^3 6L^2 9PC$  及其极射赤平投影。立方体的 9 个对称面中,1 个是水平的,投影为基圆;4 个是直立的,投影为米字形的直径;另 4 个是倾斜的,投影为 4 个以直径为弦的大圆弧。对称轴中的  $4L^3$  全是倾斜的,它们的投影都在基圆内; $6L^2$  中,2 个是水平的投影在基圆上,4 个是倾斜的投影在基圆内。

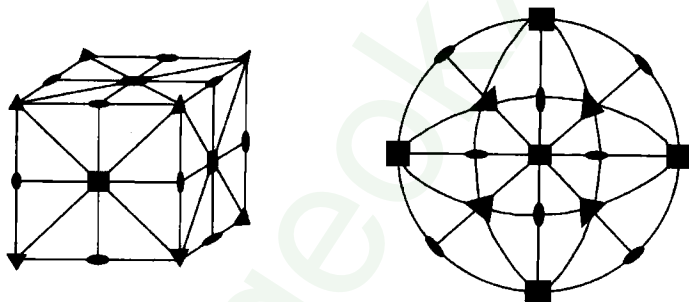


图 4-13 立方体的全部对称要素  $3L^4 4L^3 6L^2 9PC$  及其极射赤平投影

## 第三节 对称要素的组合定理

晶体的对称有多种形式。有的晶体只有一个对称要素,如钠长石仅有一个对称心  $C$ ;但大多数晶体具有多个对称要素,即存在多个对称要素的组合。构成组合的多个对称要素在空间上的分布符合整体的对称关系,即具有一定的规律,这些规律就是对称要素的组合定理。利用这些组合定理可以简便快捷地进行对称操作,推导出晶体上所有宏观的对称要素。

**定理 1** 如果有一个  $L^2$  垂直于  $L^n$ ,则必有  $n$  个  $L^2$  垂直于  $L^n$ ,且任意两个相邻  $L^2$  的夹角为  $L^n$  的基转角  $\alpha$  的一半,即  $L^n \times L^2 \perp \rightarrow L^n nL^2_{\perp}$ 。如:  $L^2 \times L^2_{\perp} \rightarrow L^2 2L^2_{\perp} (3L^2)$ ;  $L^3 \times L^2_{\perp} \rightarrow L^3 3L^2_{\perp}$ ;  $L^4 \times L^2_{\perp} \rightarrow L^4 4L^2_{\perp}$ ;  $L^6 \times L^2_{\perp} \rightarrow L^6 6L^2_{\perp}$ 。

由于  $L^n$  的基转角  $\alpha$  只能是  $360^\circ, 180^\circ, 120^\circ, 90^\circ, 60^\circ$ , 所以两个  $L^2$  的夹角就只能是  $90^\circ, 60^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ 。

**逆定理** 如果两个  $L^2$  相交,在交点上垂直两个  $L^2$  方向必产生一个  $L^n$ ,其基转角  $\alpha$  是两个  $L^2$

夹角的两倍。由此可导出其他垂直  $L^n$  平面内的  $L^2$ 。

**定理 2** 如果有一个对称面  $P$  垂直于偶次对称轴  $L^{n(\text{偶})}$ , 则在其交点存在对称心  $C$ , 即  $L^{n(\text{偶})} \times P_{\perp} \rightarrow L^n PC$ 。如:  $L^2 \times P_{\perp} \rightarrow L^2 PC, L^4 \times P_{\perp} \rightarrow L^4 PC, L^6 \times P_{\perp} \rightarrow L^6 PC$ 。

**逆定理** 如果有一个偶次对称轴  $L^{n(\text{偶})}$  与对称心  $C$  共存, 则过  $C$  且垂直于该对称轴必有一对称面  $P$ 。或, 如果有一个对称面  $P$  与对称心  $C$  共存, 则过  $C$  且垂直于  $P$  必有一个  $L^{n(\text{偶})}$ 。

**定理 3** 如果有一个对称面  $P$  包含对称轴  $L_n$ , 则必有  $n$  个  $P$  包含  $L^n$ , 且相邻两个  $P$  的夹角为  $L^n$  的基转角  $\alpha$  的一半, 即  $L^n \times P_{//} \rightarrow L^n nP_{//}$ 。如:  $L^2 \times P_{//} \rightarrow L^2 2P_{//}, L^3 \times P_{//} \rightarrow L^3 3P_{//}, L^4 \times P_{//} \rightarrow L^4 4P_{//}, L^6 \times P_{//} \rightarrow L^6 6P_{//}$ 。

由于  $L^n$  的基转角只能是  $360^\circ, 180^\circ, 120^\circ, 90^\circ, 60^\circ$ , 所以两个  $P$  的夹角就只能是  $90^\circ, 60^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ 。定理 3 与定理 1 是类似的。

**逆定理** 如果有两个对称面  $P$  相交, 则其交线必为一对称轴  $L^n$ , 其基转角  $\alpha$  为相邻两对称面夹角的两倍。由此可导出其他包含  $L^n$  的  $P$ 。

**定理 4** 如果有一个二次轴  $L^2$  垂直于旋转反伸轴  $L_i^n$ , 或者有一个对称面  $P$  包含  $L_i^n$ , 当  $n$  为奇数时必有  $n$  个  $L^2$  垂直  $L_i^n$  或  $n$  个对称面  $P$  包含  $L_i^n$ ; 当  $n$  为偶数时必有  $n/2$  个  $L^2$  垂直  $L_i^n$  或  $n/2$  个对称面  $P$  包含  $L_i^n$ , 即  $L_i^n \times L^2_{\perp} \rightarrow L_i^n n L^2_{\perp}$  或  $L_i^n \times P_{//} \rightarrow L_i^n n P_{//}$  ( $n$  为奇数),  $L_i^n \times L^2_{\perp} \rightarrow L_i^n n/2 L^2_{\perp}$  或  $L_i^n \times P_{//} \rightarrow L_i^n n/2 P_{//}$  ( $n$  为偶数)。

## 第四节 对 称 型

### 1. 对称型的概念

对称型(class of symmetry)是指晶体中所有外部对称要素的集合。

对称要素的“集合”与数学上的“群”相当, 而晶体外部对称要素必过晶体的中心, 在对所有外部对称要素进行对称操作时, 晶体中至少这一个中心点是不动的, 因此, 对称型也称为点群(point group)。

对称型的书写顺序一般是首先写从高到低不同轴次的对称轴或旋转反伸轴, 其次写对称面, 最后写对称心。但在等轴晶系中, 不论一个对称型中有无大于 3 次的对称轴, 3 次对称轴  $L^3$  应当始终放在第 2 位。

1830 年, 黑塞尔(J. F. C. Hessel)用群论导出: 在一切晶体中, 总共只能有 32 种不同的对称要素组合方式, 即 32 个对称型(表 4-2)。图 4-14 展示了几种具有常见对称型的晶体实例及其对称要素在空间上的配置关系。

表 4-2 晶体的 32 个对称型

对称要素组合		$L^n$	$L_i^n$	$L^n \times C$	$L^n \times L^2_{\perp}$	$L^n \times P_{//}$	$L_i^n \times P_{//}$	$L^n \times P_{//} \times L^2_{\perp}$
对称型 共同式		$L^n$	$L_i^n$	$L^n C^*$ $L^n PC^{**}$	$L^n n L^2$	$L^n n P$	$L_i^n n/2 L^2 n/2 P^{**}$	$L^n n L^2 n PC^*$ $L^n n L^2 (n+1) PC^{**}$
A 类 对称型	$n=1$	$L^1$		$C$				
					$L^2$	$P$		$L^2 PC$
	$n=2$	$(L^2)$		$(L^2 PC)$	$3L^2$	$L^2 2P$		$3L^2 2PC$
	$n=3$	$L^3$		$L^3 C$	$L^3 3L^2$	$L^3 3P$		$L^3 3L^2 3PC$
	$n=4$	$L^4$	$L_i^4$	$L^4 PC$	$L^4 4L^2$	$L^4 4P$	$L_i^4 2L^2 2P$	$L^4 4L^2 5PC$
	$n=6$	$L^6$	$L_i^6$	$L^6 PC$	$L^6 6L^2$	$L^6 6P$	$L_i^6 3L^2 3P$	$L^6 6L^2 7PC$
B 类对称型		$3L^2 4L^3$		$3L^2 4L^3 3PC$	$3L^4 4L^3 6L^2$	$3L_i^4 4L^3 6PC$		$3L^4 4L^3 6L^2 9PC$

\* 适用于  $n = \text{奇数}$ ; \*\* 适用于  $n = \text{偶数}$ ; 括号内为重复出现的对称型。

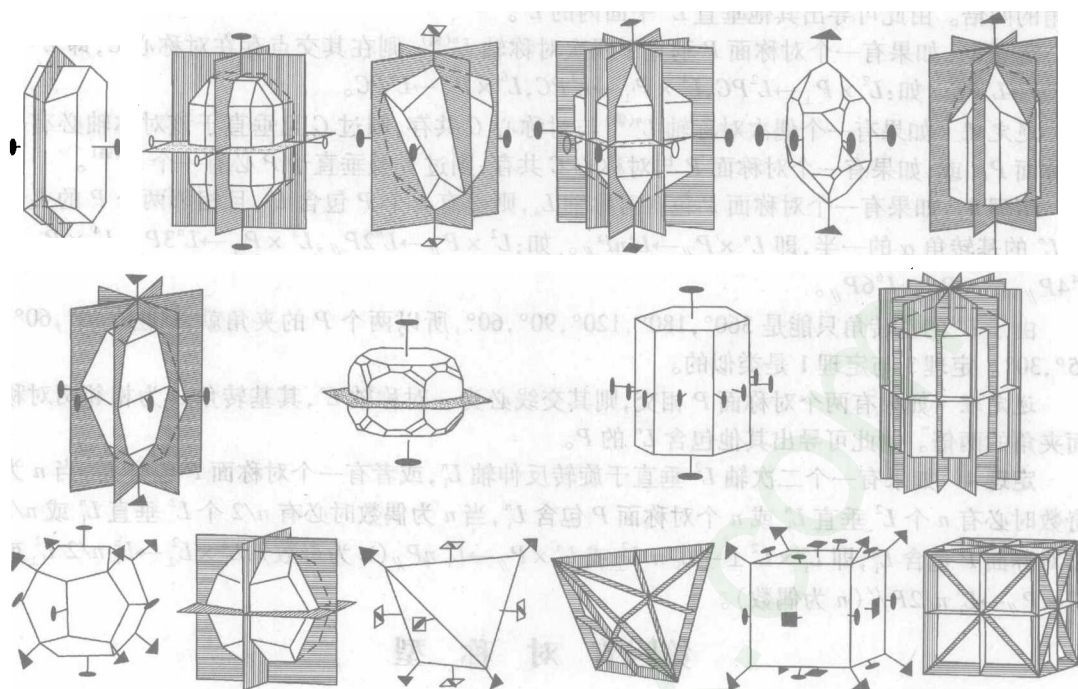


图 4-14 常见对称型中对称要素在晶体上的空间配置  
(据罗谷风,1985)

## 2. 对称型的推导

对表 4-2 中 32 个对称型的考查可以看出,一些对称型中的高次轴不多于 1 个,而另一些对称型中的高次轴可有几个。我们把高次轴不多于 1 个的对称型称为 A 类;把高次轴多于 1 个的称为 B 类。根据晶体中可能出现的外部对称要素和对称要素组合定理,用直观的方法可以推导出 32 种对称型。以下首先介绍 A 类对称型的推导。

### (1) A 类对称型的推导

A 类对称型有 27 种。根据对称要素可能的 6 种组合类型对其推导如下:

1) 对称要素单独存在。可能的对称型有  $L^1, L^2, L^3, L^4, L^6, (L_1^1 = )C, (L_1^2 = )P, (L_1^3 = )L^3C, L_1^4$  和  $L_1^6 ( = L^3P_{\perp} )$ 。

2) 对称轴与对称轴的组。由于 A 类对称型的高次轴不多于 1 个,所以只考虑  $L^n$  与  $L^2$  的组合。同时,由于  $L^2$  与  $L^n$  平行时只选取高次轴而没有意义,  $L^2$  与  $L^n$  斜交时又有可能出现多于 1 个的高次轴,故只考虑  $L^n$  与垂直于它的  $L^2$  的组合。根据对称要素组合定理  $L^n \times L_{\perp}^2 \rightarrow L^n nL_{\perp}^2$ ,可能的对称型有:  $(L^1L^2 = L^2); L^22L^2 = 3L^2; L^33L^2; L^44L^2; L^66L^2$  (括号内的对称型与其他项推导出的对称型重复,下同)。

3) 对称轴  $L^n$  与垂直于它的对称面  $P_{\perp}$  的组合。考虑到组合定理  $L^{n(\text{偶})} \times P_{\perp} \rightarrow L^{n(\text{偶})}P_{\perp}C$ ,则可能的对称型有:  $(L^1P = P); L^2PC; (L^3P = L_1^6); L^4PC; L^6PC$ 。

4) 对称轴  $L^n$  与包含它的对称面  $P_{\parallel}$  的组合。根据组合定理  $L^n \times P_{\parallel} \rightarrow L^n nP_{\parallel}$ ,可能的对称型有:  $(L^1P = P); L^22P; L^33P; L^44P; L^66P$ 。

5) 对称轴  $L^n$  与垂直于它的对称面  $P_{\perp}$  以及包含它的对称面  $P_{\parallel}$  的组合。垂直  $L^n$  的  $P$  与包含  $L^n$  的  $P$  的交线必为垂直  $L^n$  的  $L^2$ ,即  $L^n \times P_{\perp} \times P_{\parallel} \rightarrow L^n \times P_{\perp} \times P_{\parallel} \times L_{\perp}^2 \rightarrow L^n nL^2(n+1)P(C)(C$

只在有偶次轴垂直  $P$  时出现),可能的对称型有:  $(L^1 L^2 2P = L^2 2P)$ ;  $L^2 2L^3 3PC = 3L^2 3PC$ ;  $(L^3 3L^2 4P = L^6 3L^2 3P)$ ;  $L^4 4L^2 5PC$ ;  $L^6 6L^2 7PC$ 。

6) 旋转反伸轴  $L_i^n$  与垂直于它的  $L^2$  (或包含它的  $P_{//}$ ) 的组合。根据组合定理,当  $n$  为奇数时会产生  $L_i^n n L_{\perp}^1 n P_{//}$ ,可能的对称型有:  $(L_i^1 L^2 P = L^2 PC)$ ;  $L_i^3 3L^2 3P = L^3 3L^2 3PC$ ; 当  $n$  为偶数时会产生  $L_i^n (n/2) L_{\perp}^2 (n/2) P_{//}$ ,可能的对称型有:  $(L_i^2 L^2 P = L^2 2P)$ ;  $L_i^4 2L^2 2P$ ;  $L_i^6 3L^2 3P = L^3 3L^2 4P$ 。

以上 6 个组合类型中共导出 35 个对称型,其中重复的有 8 个,故实际导出的 A 类对称型有 27 种。

### (2) B 类对称型的推导

B 类对称型有多个高次轴。首先考虑高次轴  $L^4$  与  $L^3$  的组合:设有 1 个  $L^4$  与  $L^3$  斜交于晶体中心,由于  $L^4$  的作用,在  $L^4$  的周围可获得 4 个  $L^3$ ;在每个  $L^3$  上距晶体中心等距离的地方取 1 个点,连结这些点可以得到 1 个正四边形(即图 4-15 中立方体的正方形的面), $L^4$  出露于正四边形的中心, $L^3$  出露于正四边形的角顶;由于  $L^3$  的作用,在  $L^3$  的周围必定可以获得 3 个正四边形,它们汇集而成 1 个凸三面角, $L^3$  即出露于这个凸三面角的角顶上;这样就获得了 1 个由 6 个正四边形和 8 个凸三角组成的正多面体——立方体,高次轴  $L^4$  与  $L^3$  的组合就相当于正四边形所组成的正多面体——立方体中高次轴的组合。

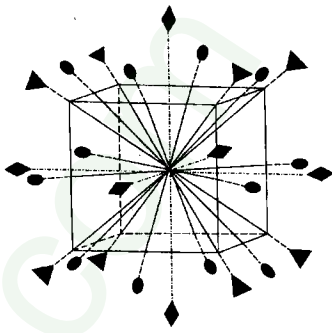


图 4-15  $L^4$  与  $L^3$  的组合  
(据潘兆麟等,1993)

由此可知,在 B 类对称型中,高次轴  $L^n$  与  $L^m$  的组合,相当于由正多边形所组成的正多面体中的高次轴的组合。

在立体几何学中已证明,一个凸多面角至少须由 3 个面组成,且其面角之和须小于  $360^\circ$ 。因此围成正多面体的正多边形只可能是正三角形(内角  $60^\circ$ )、正方形(内角  $90^\circ$ )和正五边形(内角  $108^\circ$ )。它们可能围成的正多面体及其所具有的对称轴的组合作如表 4-3 所列。从中可以看出,正三角二十面体和正五角十二面体皆具有  $L^5$ ,与晶体的对称不符,可不予考虑。其余 3 种多面体中对称轴的组合作有下面两种类型:①立方体和八面体为  $3L^4 4L^3 6L^2$ ;②四面体为  $3L^2 4L^3$ 。

表 4-3 正多边形可能围成的正多面体及其对称轴组合

正多边形		正三角形			正四边形	正五边形
正多面体		四面体	八面体	正三角二十面体	立方体	正五角十二面体
多面体的面、 棱、角数目	面	4	8	20	6	12
	棱	6	12	30	12	30
	角	4	6	12	8	20
对称轴		$3L^2 4L^3$	$3L^4 4L^3 6L^2$	$6L^5 10L^3 15L^2$	$3L^4 4L^3 6L^2$	$6L^5 10L^3 15L^2$

在第一种对称型  $3L^4 4L^3 6L^2$  中加入一个不产生新对称轴的对称面,可以获得如下的第 3 种对称型:③  $3L^4 4L^3 6L^2 9PC$ 。

在上述第二种对称型  $3L^2 4L^3$  中加入不产生新对称轴的对称面的方法有二,其一是垂直  $L^2$  的对称面,其二是与两个  $L^2$  等角度( $45^\circ$ )斜交的对称面,其结果可分别获得如下的第 4 种和第 5 种对称型:④  $3L^2 4L^3 3PC$ ;⑤  $3L^4 4L^3 6P$ 。

属于 B 类的对称型共有上列的 5 种。

综合 A, B 两类,晶体中可能有的对称型共 32 种。

### 3. 对称型的国际符号和申弗利斯符号

前面介绍的对称要素和对称型都是以习惯符号给出的。对称型习惯符号的书写不考虑方

向性,也较繁琐。以下介绍两种较简明的对称型符号。

(1) 对称型的国际符号

对称型的国际符号(international symbol)由 Hermann 和 Mauguin 所创,也称为 Hermann-Mauguin 符号或 H-M 符号。它不但能指示对称要素的组合,也能指示对称要素的方位。在对称型的国际符号中,用  $n(1,2,3,4,6)$  代表相应轴次的对称轴  $L^n$ ;用  $\bar{n}(1,2,3,4,6)$  代表相应轴次的旋转反伸轴  $L_i^n$ ;用  $m$  代表对称面(法线方向)。若对称面法线和对称轴在晶体上重合(即对称面与对称轴垂直),则两者之间以斜线或横线隔开,如  $L^2PC$  国际符号以  $2/m$  表示。32 个对称型的国际符号列于表 4-4。

表 4-4 对称型的符号及其特征

晶系	对称型国际 符号特征	对 称 型			
		习惯符号	国际符号 (完整形式)	国际符号 (简化形式)	申弗利斯符号
三斜晶系	只有一位,只有数字 1 和 $\bar{1}$	1. $L^1$	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{1}$	$C_1$
		2. $C^*$	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{1}$	$C_i$
单斜晶系	只有一位,无 $\geq 3$ 的 数字	3. $L^2$	2	2	$C_2$
		4. $P$	$m$	$m$	$C_s$
		5. $L^2PC$	$2/m$	$2/m$	$C_{2h}$
斜方晶系	多于一位,无 $\geq 3$ 的 数字	6. $3L^2$	222	222	$D_2$
		7. $L^22P$	$mm2$	$mm$	$C_{2v}$
		8. $3L^23PC$	$2/m2/m2/m$	$mmm$	$D_{2h}$
三方晶系	第一序位为 3 或 $\bar{3}$	9. $L^3$	$\frac{3}{3}$	$\frac{3}{3}$	$C_3$
		10. $L^3C$	$\frac{3}{3}$	$\frac{3}{3}$	$C_{3i}$
		11. $L^33L^2$	32	32	$D_3$
		12. $L^33P$	$3m$	$3m$	$C_{3v}$
		13. $L^33L^23PC$	$\bar{3}2/m$	$\bar{3}m$	$D_{3d}$
四方晶系	第一序位为 4 或 $\bar{4}$	14. $L^4$	4	4	$C_4$
		15. $L_i^4$	$\frac{4}{4}$	$\frac{4}{4}$	$S_4$
		16. $L^4PC$	$4/m$	$4/m$	$C_{4h}$
		17. $L^44L^2$	422	42	$D_4$
		18. $L^44P$	$4mm$	$4mm$	$C_{4v}$
		19. $L_i^42L^22P$	$\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$	$D_{2d}$
六方晶系	第一序位为 6 或 $\bar{6}$	20. $L^44L^25PC$	$4/m2/m2/m$	$4/mmm$	$D_{4h}$
		21. $L^6$	6	6	$C_6$
		22. $L_i^6$	$\frac{6}{6}$	$\frac{6}{6}$	$C_{3h}$
		23. $L^6PC$	$6/m$	$6/m$	$C_{6h}$
		24. $L^66L^2$	622	62	$D_6$
		25. $L^66P$	$6mm$	$6mm$	$C_{6v}$
等轴晶系	第二序位为 3	26. $L_i^63L^23P$	$\bar{6}2m$	$\bar{6}2m$	$D_{3h}$
		27. $L^66L^27PC$	$6/m2/m2/m$	$6/mmm$	$D_{6h}$
		28. $3L^24L^3$	23	23	$T$
		29. $3L^24L^33PC$	$2/m\bar{3}$	$m\bar{3}$	$T_h$
		30. $3L^44L^36L^2$	432	43	$O$
		31. $3L_i^44L^36P$	$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$	$T_d$
等轴晶系	第二序位为 3	32. $3L^44L^36L^29PC$	$4/m\bar{3}2/m$	$m\bar{3}m$	$O_h$

\* 常见的重要对称型。

对称型的国际符号有1~3个序位。从表4-4可知各晶系国际符号具有明显特征:低级晶族的三斜、单斜和斜方晶系无高次轴,故国际符号中无3、4和6等数字(其中,三斜晶系的国际符号只有一位,为数字1或 $\bar{1}$ ;单斜晶系的国际符号也只有一位,是数字2或 $m$ 或二者的组合;斜方晶系国际符号的序位有2或3个,由2或 $m$ 及其组合组成);中级晶族各晶系只有一个高次轴,其国际符号第一位是代表各晶系唯一高次轴的数字,即三方、四方和六方晶系的国际符号,第一位分别是3或 $\bar{3}$ 、4或 $\bar{4}$ 和6或 $\bar{6}$ ;等轴晶系的国际符号第二位总是3。因此,通过国际符号可以很容易地判断晶体所属的晶族晶系。

对称型的国际符号之所以具有以上特征,除了各晶系对称要素不同之外,还因为不同晶系国际符号的序位代表的晶体方向不同。有关内容见晶体定向一章。

在对称型中,有的对称要素通过对称操作和组合定理及逆定理可以推导出来,具有等同性或派生性。对称型的国际符号中省略了等同的和派生的对称要素,因此使用起来比习惯符号要简捷得多。例如,国际符号 $2/m$ 中,2代表 $L^2$ , $m$ 代表与 $L^2$ 垂直的对称面(法线与 $L^2$ 重合),根据对称要素组合定理 $L^{n(\text{偶})} \times P_{\perp} \rightarrow L^{n(\text{偶})} P_{\perp} C$ , $L^2$ 和 $P_{\perp}$ 组合产生 $C$ ,因此 $2/m$ 代表的对称型为 $L^2 PC$ 。这一例子中,对称型的习惯符号有3位,而国际符号只有1位。对更复杂的(如在等轴晶系)对称型而言,其国际符号在这方面的优势更加明显(表4-4)。

鉴于国际符号的简捷性和方向性,它在现代结晶学与矿物学文献中成为最常用的对称型符号。

## (2) 对称型的申弗利斯符号

对称型的申弗利斯符号(Schönflies symbol)用大写字母 $T, O, C, D, S$ 和其右下角的数字1, 2, 3, 4, 6或小写字母 $i, s, v, h, d$ 或数字-字母组合表示。

$C_n$ :表示 $L^n$ ,如 $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6$ 分别表示 $L^1, L^2, L^3, L^4, L^6$ 。

$C_{nh}$ ( $h$ ——水平的):表示 $L^n \times P_{\perp} \rightarrow L^n P_{\perp} (C)$ 组合,如 $(C_{1h}), C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}, C_{6h}$ 分别表示 $(P), L^2 PC, L^3 P(L^6), L^4 PC, L^6 PC$ 。

$C_{nv}$ ( $v$ ——直立的):表示 $L^n \times P_{\parallel} \rightarrow L^n n P_{\parallel}$ 组合,如 $C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v}$ 分别表示 $L^2 2P, L^3 3P, L^4 4P, L^6 6P$ 。

$D_n$ :表示 $L^n \times L_{\perp}^2 \rightarrow L^n n L_{\perp}^2$ 组合,如 $D_2, D_3, D_4, D_6$ 分别表示 $L^2 2L^2(3L^2), L^3 3L^2, L^4 4L^2, L^6 6L^2$ 。

$D_{nh}$ :表示 $L^n \times L_{\perp}^2 \times P_{\perp} \rightarrow L^n n L^2 (n+1) P(C)$ 组合,如 $D_{2h}, D_{3h}, D_{4h}, D_{6h}$ 分别表示 $3L^2 3PC, L^3 3L^2 4P(L^6 3L^2 3P), L^4 4L^2 5PC, L^6 6L^2 7PC$ 。

$D_{nd}$ ( $d$ ——对角线的):表示 $L^n$ 或 $L_{\perp}^n, L^2$ 和 $P$ 的组合,其中 $L^2$ 垂直于 $L^n$ 或 $L_{\perp}^n, P$ 不包含 $L^2$ 而位于2个 $L^2$ 之间并垂直平分其夹角,如 $D_{2d}$ 代表 $L^4 2L^2 2P, D_{3d}$ 代表 $L^3 3L^2 3PC$ 。

$C_{ni}$ ( $i$ ——反伸):表示 $n$ 次旋转反伸轴,如 $C_i$ 表示 $L_i^1 = C, C_{3i}$ 表示 $L_i^3 = L^3 C$ 。

$C_{ns}$ 和 $S_n$ ( $s$ ——反映):表示 $n$ 次旋转反映轴,如 $C_s$ 表示 $L_s^1 = P; S_4$ 代表 $L_s^4 = L_i^4$ 。

$T$ :代表四面体中对称轴的组 $3L^2 4L^3$ ;  $T_h$ 代表 $3L^2 4L^3$ 中加入了水平对称面获得 $3L^2 4L^3 3PC$ ;  $T_d$ 代表 $3L^2 4L^3$ 中加入了平分 $L^2$ 夹角的对称面获得 $3L^4 4L^3 6P$ 。

$O$ :代表八面体中对称轴的组 $3L^4 4L^3 6L^2, O_h$ 代表 $3L^4 4L^3 6L^2$ 中加入了水平对称面获得 $3L^4 4L^3 6L^2 9PC$ 。

32个对称型的申弗利斯符号见表4-4。

## 第五节 晶体的对称分类

对晶体进行科学分类是深入研究晶体其他属性的重要基础。由于对称性是晶体的基本性质,按照对称性能够对晶体进行科学的划分,这种分类就是晶体的对称分类。晶体的对称分类体系中共包括3个晶族、7个晶系和32个晶类。熟练掌握这一分类体系及其划分依据(表4-5)对结晶学和矿物学的研究是十分必要的。

表 4-5 晶体的对称分类

晶族	对称特点	晶系	对称特点	对称型			晶类名称	晶体实例
				习惯符号	申弗利 斯符号	国际符号 (简化)		
低级晶族	无高次轴	三斜晶系	无 $L^2$ 或 $P$	1. $L^1$ 2. $C$	$C_1$ $C_i$	$1$ $\bar{1}$	单面 平行双面	高岭石 钙长石
		单斜晶系	$L^2$ 或 $P$ 均不多于一个	3. $L^2$ 4. $P$ 5. $L^2PC$	$C_2$ $C_s$ $C_{2h}$	2 $m$ $2/m$	轴双面 反映双面 斜方柱	镁铅矾 斜晶石 石膏
		斜方晶系	$L^2$ 或 $P$ 多于一个	6. $3L^2$ 7. $L^22P$ 8. $3L^23PC$	$D_2$ $C_{2v}$ $D_{2h}$	222 $mm$ $mmm$	斜方四面体 斜方单锥 斜方双锥	泻利盐 异极矿 重晶石
中级晶族	只有一个高次轴	三方晶系	唯一高次轴 $L^3$	9. $L^3$ 10. $L^3C$ 11. $L^33L^2$ 12. $L^33P$ 13. $L^33L^23PC$	$C_3$ $C_{3i}$ $D_3$ $C_{3v}$ $D_{3d}$	3 $\bar{3}$ 32 $3m$ $\bar{3}m$	三方单锥 菱面体 三方偏方面体 复三方单锥 复三方偏三角面体	细硫锑铅矿 白云石 $\alpha$ -石英 电气石 方解石
		四方晶系	唯一高次轴 $L^4$	14. $L^4$ 15. $L_i^4$ 16. $L^4PC$ 17. $L^44L^2$ 18. $L^44P$ 19. $L_i^42L^22P$ 20. $L^44L^25PC$	$C_4$ $S_4$ $C_{4h}$ $D_4$ $C_{4v}$ $D_{2d}$ $D_{4h}$	4 $\bar{4}$ $4/m$ 42 $4mm$ $\bar{4}2m$ $4/mmm$	四方单锥 四方四面体 四方双锥 四方偏方面体 复四方单锥 复四方偏三角面体 复四方双锥	四银铅矿 砷硼钙石 白钨矿 镍矾 羟氯银铅矿 黄铜矿 锆石
		六方晶系	唯一高次轴 $L^6$	21. $L^6$ 22. $L_i^6$ 23. $L^6PC$ 24. $L^66L^2$ 25. $L^66P$ 26. $L_i^63L^23P$ 27. $L^66L^27PC$	$C_6$ $C_{3h}$ $C_{6h}$ $D_6$ $C_{6v}$ $D_{3h}$ $D_{6h}$	6 $\bar{6}$ $6/m$ 62 $6mm$ $\bar{6}2m$ $6/mmm$	六方单锥 三方双锥 六方双锥 六方偏方面体 复六方单锥 复三方双锥 复六方双锥	霞石 磷酸氢二银 磷灰石 $\beta$ -石英 红锌矿 蓝锥矿 绿柱石
		等轴晶系	必有 $4L^3$	28. $3L^24L^3$ 29. $3L^24L^33PC$ 30. $3L^44L^36L^2$ 31. $3L_i^44L^36P$ 32. $3L^44L^36L^29PC$	$T$ $T_h$ $O$ $T_d$ $O_h$	23 $m\bar{3}$ 432 $\bar{4}3m$ $m\bar{3}m$	五角三四面体 偏方复十二面体 五角三八面体 六四面体 六八面体	香花石 黄铁矿 赤铜矿 黝铜矿 方铅矿

注:黑体者为较常见的重要对称型。

### 1. 晶体对称分类体系和分类依据

晶族 (crystal category) 的划分 根据是否有高次轴以及有一个或多个高次轴,把晶体分为低级晶族 (lower category, 无高次轴)、中级晶族 (intermediate category, 只有一个高次轴) 和高级晶族 (higher category, 有多个高次轴) 等 3 个晶族。

晶系 (crystal system) 的划分 在各晶族中,再根据对称特点将低级晶族的晶体划分为三斜

晶系(triclinic system,无对称轴和对称面)、单斜晶系(monoclinic system,二次轴和对称面均不多于1个)和斜方晶系(orthorhombic system,二次轴或对称面多于1个);将中级晶族晶体划分为四方晶系(tetragonal system,有1个四次轴或四次旋转反伸轴)、三方晶系(trigonal system,有1个三次轴或三次旋转反伸轴)和六方晶系(hexagonal system,有1个六次轴或六次旋转反伸轴);高级晶族只有等轴晶系(isometric system,cubic system,有4个三次轴)。

晶类(crystal class)的划分 属于同一对称型(点群)的晶体可归为一类,称为晶类。晶体中共有32种对称型,便有32个晶类。通常按照只出现在一个对称型中的单形即所谓“一般形”的名称对晶类进行命名。如,正长石、普通辉石、石膏等晶体都具有 $L^2PC$ 的对称型,属于该对称型的一般形为斜方柱,因此这3种矿物都属于斜方柱晶类;钠长石晶体的对称型为 $C$ ,属于该对称型的一般形为平行双面,故钠长石为平行双面晶类。有关“单形”和“一般形”的概念详见“单形与聚形”一章。

## 2. 晶体在不同类别中的分布

自然界矿物晶体种数最多的3个晶系依次是斜方、单斜和等轴晶系,它们共占矿物种总数的2/3,其中斜方和单斜晶系约各占1/4,等轴晶系约占1/6;而属于 $2/m$ 、 $mmm$ 和 $m3m$ 的矿物晶体分别占21.5%、20%和10%。目前尚未发现属于 $\bar{6}$ 对称型的矿物晶体。如果将人工合成晶体和矿物晶体一起统计,排在前3位的仍为以上晶系和对称型;等轴晶系约占1/4强,单斜和斜方晶系约各占1/5;属于 $m3m$ 、 $2/m$ 和 $mmm$ 的晶体分别占17.5%、15.5%和12%。

## 思考题及习题

- 1)总结对称轴、对称面在晶体上可能出现的位置。
- 2)旋转反伸轴与简单对称要素有何关系? $L_4^3$ 可以由哪些对称要素替代?
- 3) $L^33L^24P$ 属于什么晶系?为什么?(从 $L_4^6$ 考虑)
- 4)找出晶体模型上的对称要素,分析晶体上这些对称要素共存符合哪一条组合定理?写出晶体的对称型、晶系。
- 5) $m3m$ 是晶体的什么符号?从该符号中可以看出该晶体是属于什么晶系?有哪些对称要素?
- 6)怎样划分晶族与晶系?下列对称型各属何晶族与晶系?  
 $L^2PC$      $3L^23PC$      $L^44L^25PC$      $L^66L^27PC$      $C$      $3L^44L^36L^29PC$      $L^33L^2$   
 $L^33L^23PC$      $3L^24L^33PC$
- 7)第6题中的对称型符合哪些对称要素组合定理?
- 8)对称型 $L^2PC$ 和 $L^33L^23PC$ 中二次对称轴与对称面是垂直还是包含关系?
- 9)对称型 $L^33L^23PC$ 中三次轴与对称面是何种关系?有与三次轴垂直的对称面吗?
- 10)中级晶族的晶体上,若有 $L^2$ 与高次轴并存,一定是彼此垂直而不能斜交的,为什么?
- 11)国际符号为何最多只有3个序位?它如何代表一个晶体的所有对称要素?如 $4/mmm$ 。
- 12)如何通过国际符号判断晶体所属的晶系?
- 13)区别下列对称型的国际符号并写出相应的习惯符号:  
 $23$ 与 $32$      $3m$ 与 $m3$      $6/mmm$ 与 $6mm$   
 $3m$ 与 $2m$      $4/mmm$ 与 $mmm$      $m3m$ 与 $mmm$

# 第五章 晶体定向与晶体符号

## 本章概要

- 1) 晶体的三轴坐标系和四轴坐标系;各晶系晶体的选轴原则和晶胞参数(晶体常数)特点。
- 2) 晶面符号、晶棱符号、晶带定律。

通过晶体外部对称一章的学习,我们知道晶体的晶面、晶棱和角顶的分布是严格地受其所属对称型约束的,当只考虑几何形态而不考虑晶体内部结构时,已知晶面、晶棱和角顶的分布便能求得晶体所具有的对称型。但反过来,已知对称型并不能确切地求得晶体具体的几何形态。而在实际工作中,确切地描述矿物晶体的几何形态对反演矿物形成时的物理化学条件乃至地质找矿都是十分重要的。为此,有必要掌握描述晶体各晶面和晶棱空间方位及其相互关系并导出晶体几何多面体外形的办法。这个方法的核心是借助一定的坐标系统,用若干数学符号来表征晶体各相关几何要素的空间方位。这就是本章所要讨论的问题。

需要指出的是,本章拟介绍的晶面符号不仅用于表征晶体外部形态特征,还用于表征矿物的解理、裂开、矿物中包裹体的分布、矿物切片、矿物光性及晶体内部结构等与晶体方向有关的内容,应当重点掌握。

## 第一节 晶体坐标系的选择

### 1. 晶体定向与晶体的坐标系统

晶体定向(crystal orientating)就是在晶体中选定一个与晶体对称特征相符合的坐标系统,使晶体中各种几何要素得到相应的空间取向。与数学上的坐标系相似,晶体的坐标系也包括两个最基本的要素,即轴单位和轴角。晶体定向的本质就是要选择晶轴并确定各个晶轴上的轴单位。

晶轴(crystallographic axis)即晶体的坐标轴,与晶体中一定的行列相适应,一般有3个,分别记作 $X$ 、 $Y$ 和 $Z$ 轴或 $a$ 、 $b$ 和 $c$ 轴。各结晶轴的交点位于晶体中心。晶轴的安置是以上下直立方向为 $Z$ 轴,正端朝上;前后方向为 $X$ 轴,正端在前;左右方向为 $Y$ 轴,右端为正(图5-1)。这种由3个晶轴构成的坐标系称三轴坐标系。

习惯上,人们还为三方和六方晶系的晶体设置了另一套坐标系统,即在水平方向上安置了正端交角互为 $120^\circ$ 的3个晶轴,分别称为 $X$ 、 $Y$ 和 $U$ 轴或 $a$ 、 $b$ 和 $u$ 轴, $X$ 轴的正端朝左前方, $Y$ 轴正端朝正右方, $U$ 轴正端朝左后方,直立轴仍为 $Z$ 轴或 $c$ 轴,正端朝上,构成四轴坐标系(图5-2)。

晶轴选定后,各晶轴间的空间关系就确定了。我们把晶轴正端之间的交角称为轴角(inter-axial angle),分别以 $\alpha$ 代表 $b$ 轴 $\wedge$  $c$ 轴、 $\beta$ 代表 $a$ 轴 $\wedge$  $c$ 轴、 $\gamma$ 代表 $a$ 轴 $\wedge$  $b$ 轴(图5-1,图5-2)。

事实上,晶轴选定后,每个晶轴上用于计量长度的轴单位也就确定了。因为,轴单位(axial unit distance)就是每个晶轴上所对应行列的结点间距。设 $X$ 、 $Y$ 和 $Z$ 轴对应行列的结点间距为 $a_0$ 、 $b_0$ 、 $c_0$ ,则 $X$ 、 $Y$ 和 $Z$ 轴的轴单位就是 $a_0$ 、 $b_0$ 、 $c_0$ 。

在晶体形态研究中,由于有关的讨论只涉及晶面、晶棱等的方向而不涉及它们的具体位置和大小,因此实际上无需知道3个结晶轴单位的绝对长度,只需根据晶体的对称特点定出3个轴单位之间的比值就可以了。在此,我们把 $X$ 、 $Y$ 和 $Z$ 三个结晶轴的轴单位连比记作 $a:b:c$ ,称为轴率(axial ratios)。轴率通常写成以 $b$ 为1的连比式 $A:1:C$ ,在此 $A=a/b$ 、 $C=c/b$ 。例如重晶石晶体的轴率写为 $a:b:c=1.6290:1:1.3132$ 。

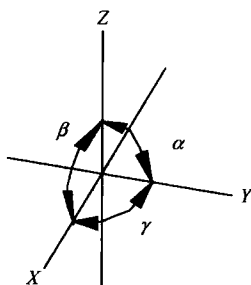


图 5-1 三轴坐标系的晶轴与轴角

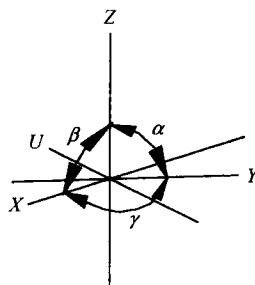


图 5-2 四轴坐标系的晶轴与轴角

## 2. 各晶系晶体定向的选轴原则

选择晶轴时应遵循以下原则：

1) 应符合晶体所固有的对称性。为此，晶轴应与对称轴或对称面的法线重合；若无对称轴和对称面，晶轴可平行晶棱选取。

2) 在上述前提下，应尽可能使各晶轴相互垂直或近于垂直，并使轴单位趋于相等（在晶体宏观形态上是使轴率趋于 1），即尽可能使之趋于  $a = b = c$ ； $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 。

由于对称上的特殊性，六方和三方晶系晶体采用四轴定向，其他晶系都采用三轴定向。各晶系中各个对称型的晶体定向方法见表 5-1。

选定晶体的坐标系统并对晶体进行定向后，我们就掌握了描述晶体对称型国际符号方向性的合适工具。各晶系对称型国际符号不同序位所代表的结晶学方向如表 5-2。

表 5-1 各晶系晶体定向表

晶族	晶系	对称型	结晶轴的选择		结晶轴的安置及晶体常数特征	
高级晶族	等轴晶系	$3L^2 4L^3$ , $3L^2 4L^3 3PC$	三个互相垂直的 $L^2$ 分别为 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 轴		$a$ 轴前后水平, $b$ 轴左右水平, $c$ 轴直立; $a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	
		$3L_4^4 4L^3 6P$	三个互相垂直的 $L_4^4$ 分别为 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 轴			
		$3L^4 4L^3 6L^2$ , $3L^4 4L^3 6L^2 9PC$	三个互相垂直的 $L^4$ 分别为 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 轴			
中级晶族	四方晶系	$L^4, L_4^4, L^4 PC$	唯一高次轴	两个均垂直于 $c$ 轴且本身间也相互垂直的适当晶棱方向分别为 $a$ 轴和 $b$ 轴	$c$ 轴直立 $a$ 轴前后水平, $a=b\neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	
		$L^4 4P$		两个相互垂直的 $P$ 的法线分别为 $a$ 轴和 $b$ 轴		
		$L^4 4L^2, L_4^4 2L^2 2P$ , $L^4 4L^2 5PC$		两个互相垂直的 $L^2$ 分别为 $a$ 轴和 $b$ 轴		
	六方晶系和三方晶系	$L^6 6L^2, L^6 6L^2 7PC$ , $L^3 3L^2, L^3 3L^2 3PC$	为直立的 $c$ 轴	三个互成 $60^\circ$ 交角的 $L^2$ 分别为 $a$ 轴、 $b$ 轴和 $u$ 轴	$b$ 轴左右水平 $a$ 轴水平朝正前偏左 $30^\circ$ , $u$ 轴水平朝正后偏左 $30^\circ$ ; $a=b\neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ$ $\gamma=120^\circ$	
		$L^6 6P, L_4^6 3L^2 3P, L^3 3P$		三个互成 $60^\circ$ 交角的 $P$ 的法线分别为 $a$ 轴、 $b$ 轴和 $u$ 轴		
		$L^6, L_4^6, L^6 PC$ $L^3, L^3 C$		三个均垂直于 $c$ 轴且本身间互成 $60^\circ$ 交角的适当晶棱方向分别为 $a$ 轴、 $b$ 轴和 $u$ 轴		

续表

晶族	晶系	对称型	结晶轴的选择		结晶轴的安置及晶体常数特征	
低级	斜方晶系	$3L^2, 3L^23PC$	三个互相垂直的 $L^2$ 分别为 $c$ 轴、 $b$ 轴和 $a$ 轴		$c$ 轴直立	$a$ 轴前后水平, $b$ 轴左右水平; $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
		$L^22P$	$L^2$ 为 $c$ 轴,两个互相垂直的 $P$ 的法线分别为 $b$ 轴和 $a$ 轴			
中级	单斜晶系	$L^2, L^2PC$	$L^2$ 为 $b$ 轴	两个均垂直于 $b$ 轴的适当晶棱方向分别为 $c$ 轴和 $a$ 轴	$c$ 轴直立	$b$ 轴左右水平, $a$ 轴前后、朝前下方倾; $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \beta > 90^\circ$
		$P$	$P$ 的法线为 $b$ 轴			
高级	三斜晶系	$L^1, C$	三个适当的晶棱方向为 $c$ 轴、 $b$ 轴和 $a$ 轴		$c$ 轴直立	$b$ 轴左右、朝右下方倾, $a$ 轴大致前后、朝前下方倾; $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ $\alpha > 90^\circ, \beta > 90^\circ, \gamma > 90^\circ$

表 5-2 各晶系对称型的国际符号中序位所代表的晶体方向

晶系	国际符号序位	各序位代表的晶体方向	举例	
			对称型 (对称要素选结晶轴)	对称型的国际符号 (序位代表的对称要素)
三斜晶系	1	任意方向	$C$	1
单斜晶系	1	$Y$ 轴方向	$L^2PC$ ( $L^2$ 或 $P$ 的法线为 $Y$ 轴)	$2/m$ ( $Y$ 轴方向:有 $L^2$ 和 $P$ 的法线)
斜方晶系	第一序位 第二序位 第三序位	$X$ 轴方向( $\bar{a}$ ) $Y$ 轴方向( $\bar{b}$ ) $Z$ 轴方向( $\bar{c}$ )	$L^22P$ (两个 $P$ 的法线分别为 $X$ 、 $Y$ 轴; $L^2$ 为 $Z$ 轴)	$mm2(mm)$ (一、二序位方向均有 $P$ 的法线;三序位为 $L^2$ )
四方晶系	第一序位 第二序位 第三序位	$Z$ 轴( $L^4$ )方向( $\bar{c}$ ) $X$ (或 $Y$ )轴方向( $\bar{a}$ ) $X$ 和 $Y$ 轴角分线方向( $\bar{a} + \bar{b}$ )	$L^44L^25PC$ ( $L^4$ 为 $Z$ 轴;相互垂直的两个 $L^2$ 分别为 $X$ 轴和 $Y$ 轴)	$4/m2/m2/m(4/mmm)$ (一序位为 $L^4$ 和 $P$ 的法线; 二序位为 $L^2$ 和 $P$ 的法线;三序位为 $L^2$ 和 $P$ 的法线)
三方及六方晶系	第一序位 第二序位 第三序位	$Z$ 轴( $L^3, L^6$ )方向( $\bar{c}$ ) $X$ (或 $Y$ )轴方向( $\bar{a}$ ) 与 $Z$ 轴、 $Y$ 轴垂直方向( $2\bar{a} + \bar{b}$ )	$L^33L^23PC$ ( $L^3$ 为 $Z$ 轴;相邻正端呈 $120^\circ$ 的两个 $L^2$ 分别为 $X$ 轴和 $Y$ 轴)	$32/m(3m)$ (一序位为 $L^3$ ;二序位为 $L^2$ 和 $P$ 的法线;三序位为无对称要素)
等轴晶系	第一序位 第二序位 第三序位	$X$ (或 $Y$ 、 $Z$ )轴方向( $\bar{a}$ ) 三次轴方向( $\bar{a} + \bar{b} + \bar{c}$ ) $X$ 轴、 $Y$ 轴之间方向( $\bar{a} + \bar{b}$ )	$3L^24L^33PC$ (三个 $L^2$ 分别为 $X$ 轴 $Y$ 轴和 $Z$ 轴)	$2/m3(m3)$ (一序位为 $L^2$ 和 $P$ 的法线; 二序位为 $L^3$ ;三序位为无对称要素)

第二节 晶胞参数与晶体常数

1. 晶胞参数与晶体常数的概念

在晶体的坐标系统中,轴单位  $a_0, b_0, c_0$  和轴角  $\alpha, \beta, \gamma$  确切地反映了晶体结构中晶胞(即平

行六面体)的大小和形状,是晶体结构研究的重要参数,称为晶胞参数(cell parameters)。

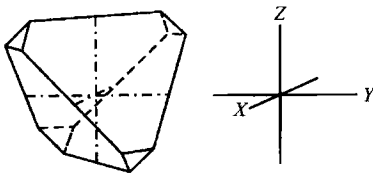
根据晶体宏观对称特点确定的晶体坐标系统的轴率  $a:b:c$  和轴角  $\alpha, \beta, \gamma$  称为晶体常数 (crystal constants)。由晶体常数可以获得晶体中晶胞的形状,但不能知道其确切大小。

## 2. 各晶系晶体常数特点

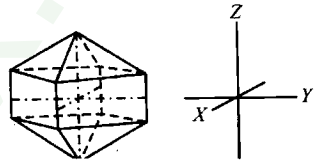
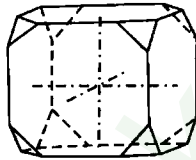
不同晶系的晶体常数特点见表 5-3 及图 5-3。

表 5-3 各晶系晶体常数特点

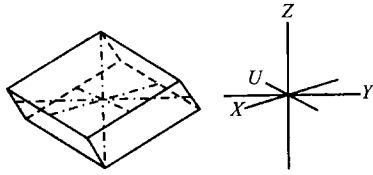
晶系	晶体常数	晶族	晶体常数特点	
			轴长	轴角
等轴晶系	$a=b=c; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	高级晶族	$a=b=c$	直角坐标
四方晶系	$a=b \neq c; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	中级晶族	$a=b \neq c$	水平轴角 $\gamma=120^\circ$ , 其他二轴角为直角
六方及三方晶系	$a=b \neq c; \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$			直角坐标
斜方晶系	$a \neq b \neq c; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$			前轴角 $\beta > 90^\circ$ , 其他二轴角为直角
单斜晶系	$a \neq b \neq c; \alpha=\gamma=90^\circ, \beta > 90^\circ$	低级晶族	$a \neq b \neq c$	全斜角
三斜晶系	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$			



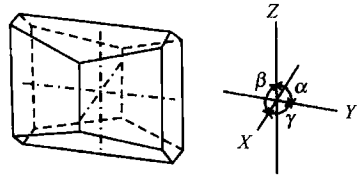
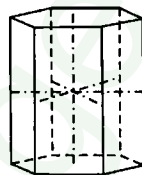
a. 等轴晶系  
闪锌矿 (左) 方铅矿 (右)



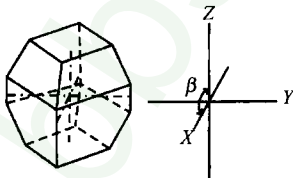
b. 四方晶系  
锆石  $a:c=1:0.64037$



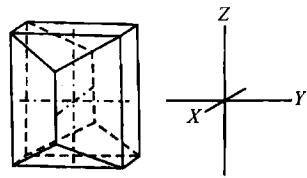
c. 三方及六方晶系  
方解石 (三方) (左)  $a:c=1:0.8543$   
绿柱石 (六方) (右)  $a:c=1:0.4989$



d. 三斜晶系  
钠长石  $a:b:c=0.6335:1:0.5577$   
 $\alpha=94^\circ 3' \quad \beta=116^\circ 29' \quad \gamma=88^\circ 9'$



e. 单斜晶系  
石膏  $a:b:c=0.7547:1:0.8543 \quad \beta=119^\circ 43'$



f. 斜方晶系  
十字石  $a:b:c=0.4734:1:0.6828$

图 5-3 各晶系晶体定向和晶体常数特点举例

三方晶系(采用菱面体坐标系,即 R 坐标系,三轴定向): $a=b=c$ ;  $\alpha=\beta=\gamma\neq 90^\circ$ ,亦不等于  $60^\circ$  及  $109^\circ 28' 16''$ 。如果在菱面体格子中, $\alpha=90^\circ, 60^\circ, 109^\circ 28' 16''$ ,根据格子的对称应分别划分为后述的立方原始格子,立方面心格子和立方体心格子。

### 第三节 晶面符号

选定晶体的坐标系后,晶体上各种几何要素在空间的相对位置便可根据它们与晶轴的关系予以确定。这种关系通常以数学符号(数字或字母)来表征,称为晶体的结晶学符号或晶体符号。

晶面符号(face symbol)就是根据晶面(或晶体中平行于晶面的其他平面)与各结晶轴的交截关系,用简单的数学符号形式来表达它们空间方位的一种结晶学符号。

晶面符号有多种形式,通常采用英国人米勒(W. H. Miller)于 1839 年所创的米氏符号。

#### 1. 三轴坐标系中晶面符号的构成

对于采用三轴坐标系(等轴晶系、四方晶系、低级晶族各晶系)的晶体,其晶面的米氏符号(Miller's symbol)由连写在一起的 3 个互质的小整数(有时也需用字母)加小括号构成,其一般形式为  $(hkl)$ 。其中的  $hkl$  称为晶面指数(face indices),它通过晶面在 3 个晶轴上截距系数的倒数比来求取,并按照晶面与  $X, Y, Z$  轴的关系顺序排列。

现举例说明如下。设有一个晶面  $(hkl)$  在  $X, Y, Z$  轴上的截距分别为  $2a, 3b, 6c$ (图 5-4)。2, 3, 6 为其截距系数,其倒数比为  $1/2:1/3:1/6=3:2:1$ ,去掉比例符号,以小括号括之,写作  $(321)$ ,即为该晶面的米氏符号。

若晶面平行于某晶轴,则晶面在晶轴上的截距系数为  $\infty$ ,截距系数的倒数应为  $0(1/\infty)$ 。如图 5-5 中  $(100)$  晶面与  $Y$  轴和  $Z$  轴平行; $(001)$  晶面与  $X$  轴和  $Y$  轴平行; $(110)$  晶面与  $X$  轴和  $Y$  轴等截距相交,与  $Z$  轴平行; $(\bar{1}10)$  晶面与  $Z$  轴平行,与  $X$  轴和  $Y$  轴等截距相交,但晶面交于  $Y$  轴的负端,则在该相应的指数上加“-”号。

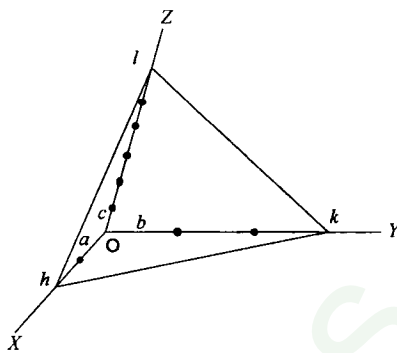


图 5-4 晶面符号的图解

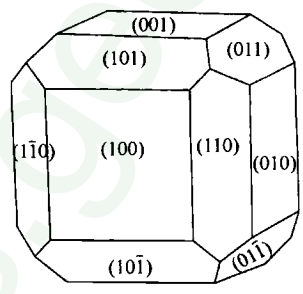


图 5-5 晶体的晶面符号举例

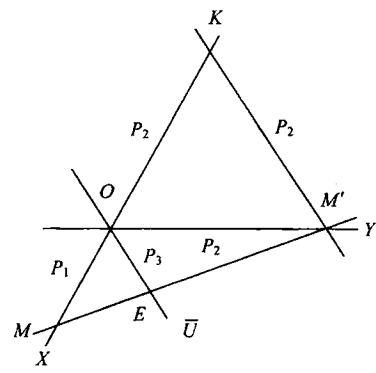


图 5-6 三方、六方晶系晶面符号中前三位指数代数之和为零图解  
(据潘兆椿等,1993)

#### 2. 四轴坐标系中晶面符号的构成

由于三方和六方晶系的晶体采用四轴坐标系定向,因此它们的晶面符号也要用四个指数表示,其米氏符号一般写为  $(hkil)$  的形式。指数的排列顺序依次与  $X, Y, U$  和  $Z$  轴对应。由晶体常数( $a=b\neq c$ )可知,三方和六方晶系的水平轴轴单位相等,故轴率总是  $1:1:1:C$ 。其中第三个晶面指数表示在  $U$  轴上的截距系数的比值,根据三角函数的几何关系,可以证明前面三个指数代数和等于零  $h+k+i=0$ 。因此,第三个指数是可以通过前两个计算得出的。

现证明  $h+k+i=0$  如下。如图 5-6,设有一晶面  $MM'$  在  $X$  轴上的截距为  $P_1$ ,在  $Y$  轴上的截

距为  $P_2$ , 在  $U$  轴上的截距为  $P_3$ 。做一平行于  $U$  轴的辅助线  $KM'$ ,  $\triangle OKM'$  为等边三角形, 每边皆等于  $P_2$ 。由于  $\triangle MKM'$  与  $\triangle MOE$  相似, 因此  $(P_1 + P_2)/P_2 = P_1/P_3$ ; 再以  $P_1$  除等式两边得:  $(P_1 + P_2)/P_1 P_2 = P_1/P_1 P_3$ , 即  $1/P_2 + 1/P_1 = 1/P_3$ 。因为米氏指数为截距系数的倒数, 故  $h + k + i = 0$ 。

### 3. 晶面符号的含义和规律

在晶面符号的实际应用中, 更多情况下主要地不是测算晶面符号, 而是理解它的含义, 想象出它在晶体上的空间方位。为此, 弄清楚晶面符号一些特殊指数的含义及各指数间的相互关系的特点是很有意义的。晶面符号具有以下规律和特点:

1) 晶面符号中指数为 0 时, 表明该晶面与相应的结晶轴平行:  $h = 0$ , 晶面平行于  $X$  轴;  $k = 0$ , 晶面平行于  $Y$  轴;  $l = 0$ , 则晶面平行于  $Z$  轴。

2) 因晶面指数是从截距系数的倒数比获得的, 故当轴单位相等时, 晶面指数越大, 在晶轴上的截距越小。如等轴晶系晶体的  $(210)$  晶面, 它在  $X$  轴上的截距小于其在  $Y$  轴上的截距, 且  $Y$  轴截距是  $X$  轴截距的 2 倍, 晶面与  $Z$  轴平行。

3) 在同一晶体上, 如有两个晶面对应的晶面指数正负相反、绝对值相等, 这两个晶面必互相平行。如  $(100)$  与  $(\bar{1}00)$ 、 $(110)$  与  $(\bar{1}\bar{1}0)$  分别代表一对相互平行的晶面。

以上晶面符号的含义和规律不仅对三轴坐标系适用, 对于四轴坐标系也适用。

### 4. 整数定律

从前述晶面符号可以看出, 晶面的指数都是数值很小的整数, 即符合整数定律。整数定律也称有理指数定律, 其内容可表述为: 晶体上任一晶面在结晶轴上的截距为轴单位的整数倍; 而晶面指数为简单的 (即绝对值很小的) 整数。简单说明如下。

由于晶面是一个面网, 晶轴是一条行列, 因此, 晶面或晶面平移后必截晶轴于某个结点。如以晶轴上的结点间距作为度量单位 (即轴单位), 则晶面在晶轴上的截距系数之比必为整数比。

图 5-7 表示平行于  $Z$  轴且截  $X$  轴于  $a_1$  点的一组面网, 他们分别截  $Y$  轴于  $b_1, b_2, b_3$  点。从面网密度来看,  $a_1 b_1 > a_1 b_2 > a_1 b_3$ , 它们在  $X$  和  $Y$  轴上的截距系数之比分别是  $a_1:b_1 = 1:1$ ,  $a_1:b_2 = 1:2$ ,  $a_1:b_3 = 1:3$ , 其相应的晶面指数分别为  $110, 210, 310$ 。显然, 面网密度越大, 晶面在晶轴上的截距系数之比越简单。

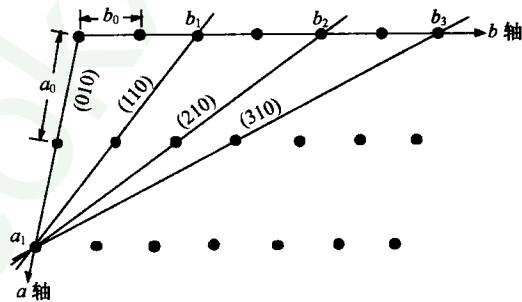


图 5-7 整数定律图解

从布拉维法则可知, 晶面常常被面网密度较大的晶面所包围。因此, 晶面在晶轴上的截距系数之比为简单整数比。

## 第四节 晶棱符号

晶棱符号 (edge symbol) 是表征晶棱 (直线) 方向的符号, 以方括号中简单的小整数形式表示。其一般式为  $[rst]$ ,  $r, s, t$  为相对于  $X, Y, Z$  轴的晶棱指数 (edge indices)。

晶棱符号不涉及晶棱的具体位置, 即所有相互平行的棱均具有同一个符号。因而任意一根晶棱都可设想进行平移, 使之通过结晶轴的交点  $O$ , 然后在其上任取一点, 求出此点在  $X, Y, Z$  轴上的坐标  $(x, y, z)$ , 并以相应的轴单位来度量, 通过连比得到 3 个晶轴上简单的小整数 (晶棱指数) 的比值  $x/a:y/b:z/c = r:s:t$ , 用方括号将 3 个指数括起来即求得晶棱符号  $[rst]$ 。

现举例说明。设晶体上有一晶棱  $OP$ , 将其平移使通过晶轴的交点, 并在其上任取一点  $M$ ,  $M$  点在 3 个晶轴上的坐标分别为  $MR = 1a$ ,  $MK = 2b$  和  $MF = 3c$  (图 5-8, 晶轴上的黑点为结点, 两相邻结点为轴单位), 那么,  $r:s:t = 1a/a:2b/b:3c/c = 1:2:3$ , 该晶棱符号为  $[123]$ 。

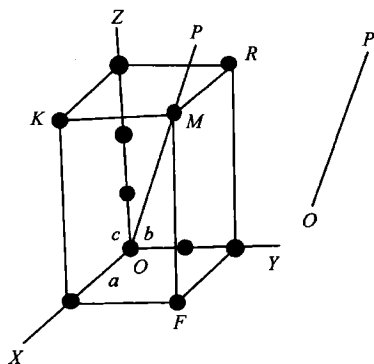


图 5-8 晶棱符号的图解

在四轴坐标系中,为了避免一个方向的晶棱出现多种不同形式并方便有关运算,通常不考虑晶棱与  $U$  轴的关系,其晶棱符号的确定方法与三轴坐标系时相同。

应注意,晶棱指数也有正负之分,但晶棱方向是同时指向两端的,即原点反向两侧为同一晶棱,如  $[201] = [\bar{2}0\bar{1}]$ 。

## 第五节 晶带符号与晶带定律

### 1. 晶带及其符号

晶带 (zone) 是交棱相互平行的一组晶面的组合。一个晶带中的晶面既可能在晶体上实际相交,也可能延展后才相交。换句话说,一个晶带的各个晶面既可彼此连接成封闭的环带,也可被其他晶面所分割。晶带的方向用通过晶体中心而平行于各晶面公共交棱的直线来表示,这条直线称为晶带轴 (zone axis)。晶带轴的符号就是晶面交棱的符号,通常用以表示晶带符号。

图 5-9 中,晶面  $(\bar{1}10)$ 、 $(100)$ 、 $(110)$ 、 $(010)$ 、 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 、 $(\bar{1}00)$ 、 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 、 $(0\bar{1}0)$  (后四个晶面在晶体后面,晶体图上没绘出) 组成一个晶带,该晶带的晶带轴为  $CC'$ ,其晶带轴符号为  $[001]$ ;此晶带上的所有晶面的赤平投影点落于同一大圆上,即投影点落在基圆上。同理,晶面  $(100)$ 、 $(011)$ 、 $(001)$ 、 $(\bar{1}01)$ 、 $(\bar{1}00)$ 、 $(\bar{1}0\bar{1})$ 、 $(00\bar{1})$ 、 $(10\bar{1})$  等又组成晶带轴为  $BB'$  的  $[010]$  晶带。此外还可以找到晶带轴为  $AA'$  的  $[100]$  晶带,晶带轴为  $DD'$  的  $[110]$  晶带等。

晶带符号除了用求晶棱符号的方法获取外,还可以直接利用垂直于晶带轴的晶面符号的转换 (其理论基础见下述) 获得,即用方括号加在该晶面的晶面指数之外获得。如果晶带轴垂直于

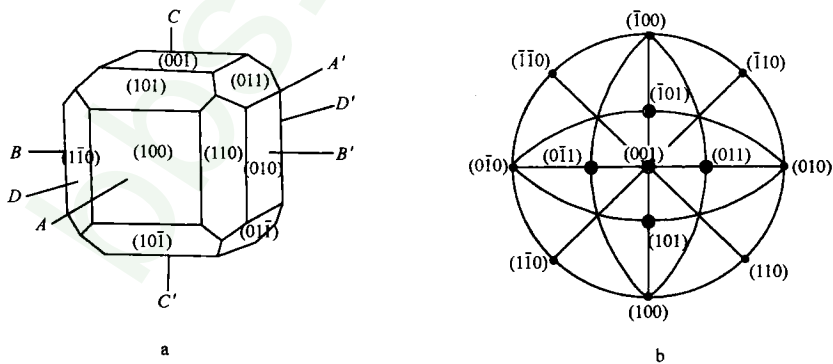


图 5-9 晶体的晶带 (a) 及其极射赤平投影 (b)

(据潘兆椿等,1993)

两个平行的晶面,则选择正值最多的晶面指数即可。例如,图 5-9 中晶带轴  $CC'$  与  $(001)$  和  $(00\bar{1})$  两个晶面垂直,选  $(001)$  晶面的晶面指数进行变换后得到该晶带的符号为  $[001]$ 。

## 2. 晶带定律

实际晶体的晶面都是按晶带分布的。这是因为晶体上的晶面都是由面网密度较大的面网所组成的,其交棱也应是结点间距较小的行列,故实际晶面和晶棱的方向都为数不多,从而分属于少数晶带。

关于晶面与晶棱的关系,早在 19 世纪初,德国结晶学家魏斯 (Weiss) 便指出:晶体上任一晶面至少属于两个晶带,这一规律称为晶带定律 (zone law)。由图 5-9 可以看出,每一个晶面与其他晶面相交,必有两个以上互不平行的晶棱,也就是一个晶面可以属于多个晶带,如晶面  $(100)$  至少属于  $[001]$  和  $[010]$  晶带 (还有可能的其他晶带,未绘出)。因此,晶带定律也可以这样表述:任意两晶棱 (晶带) 相交必可决定一可能晶面,而任意两晶面相交必可决定一可能晶棱 (晶带)。

此外,晶带定律还可以晶带方程表述,即:对任一属于  $[rst]$  晶带的晶面  $(hkl)$ ,必有

$$hr + ks + lt = 0$$

根据晶带定律和晶带方程,可以由若干已知晶面或晶带推导出晶体上一切可能晶面的位置或已知晶面所属的晶带,这在晶体定向、投影和运算中得到了广泛的应用。

## 3. 晶带方程应用举例

根据晶带方程  $hr + ks + lt = 0$ , 可以做如下的运算和推导。

(1) 求晶面  $(hkl)$  和晶面  $(mnp)$  所决定的晶棱  $[rst]$

因为:  $hr + ks + lt = 0, mr + ns + pt = 0$

则:  $r:s:t = (kp - nl):(lm - ph):(hn - mk)$

上式右方可用行列式表示:

$$\begin{vmatrix} k & l \\ n & p \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} l & k \\ p & m \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} h & k \\ m & n \end{vmatrix} \quad \text{或写作:} \quad \begin{vmatrix} h & k & l \\ n & p & m \end{vmatrix}$$

此式易于记忆,即将每一晶面的指数依次写两次,将两晶面的指数写成上下两横列。用竖线隔开并删去左右两纵行,然后交叉相乘并依次取其乘积之差。现举例说明如下。

举例 求晶面  $(100)$  和晶面  $(010)$  所决定的晶带。

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

$$r = 0 \times 0 - 1 \times 0 = 0, s = 0 \times 0 - 0 \times 1 = 0, t = 1 \times 1 - 0 \times 0 = 1$$

即此晶带的符号应为  $[001]$ 。

(2) 求位于晶带  $[rst]$  和晶带  $[uvw]$  相交处的晶面  $(hkl)$

因为:  $hr + ks + lt = 0, hu + kv + lw = 0$

则与例(1)类比,可用下列行列式计算:

$$\begin{vmatrix} r & s & t \\ u & v & w \end{vmatrix}$$

举例 求位于  $[010]$  和  $[001]$  两晶带相交处的晶面的晶面符号  $(hkl)$ 。

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$h = 1 \times 1 - 0 \times 0 = 1, k = 0 \times 0 - 1 \times 0 = 0, l = 0 \times 0 - 0 \times 1 = 0$$

即该晶面的符号为  $(100)$ 。

(3) 已知晶面( $hkl$ )和( $mnp$ )在同一晶带上,求位于此晶带上介于此两晶面之间的另一晶面的符号

因为: $hr + ks + lt = 0, mr + ns + pt = 0$

则: $(h+m)r + (k+n)s + (l+p)t = 0$

即此晶带上介于( $hkl$ )和( $mnp$ )晶面间的另一晶面的指数为 $h+m$ 、 $k+n$ 和 $l+p$ 。

举例:已知晶面(100)和(010)位于一晶带上,则在此晶带上介于此二晶面之间的另一晶面的指数应为(1+0)、(0+1)、(0+0)即(110)。

上述三例的赤平投影参见图5-9。

### 思考题与习题

- 1) 试述晶体定向的意义。
- 2) 试述晶体定向的原则,各晶系晶体定向的方法及晶体常数特点。
- 3) 晶面符号能表明晶面在晶体坐标系中的具体空间位置吗?
- 4) 晶胞参数与晶体常数的区别和意义是什么?
- 5) 同一晶带的晶面,在极射赤平投影图中怎样分布? 试举例说明。
- 6) 某矿物属于斜方晶系,具有(100), (110), (010), ( $\bar{1}10$ ), ( $\bar{1}00$ ), ( $\bar{1}\bar{1}0$ ), (010), ( $\bar{1}\bar{1}0$ ), (001), ( $\bar{0}0\bar{1}$ ), (011), ( $\bar{0}1\bar{1}$ ), ( $\bar{0}11$ )和(011)等晶面,其中哪些属于[001]晶带? 哪些属于[010]晶带? 哪些晶面为[001]与[010]两晶带所共有?
- 7) 如何判定下列晶面与晶面、晶面与晶棱、晶棱与晶棱之间的空间关系(平行、垂直或斜交):
  - ① 等轴晶系、四方晶系及斜方晶系晶体:(001)与[001]; (010)与[010]; (110)与[001]; (110)与(010)。
  - ② 单斜晶系晶体:(001)与[001]; (010)与[001]; (001)与[100]; (100)与[010]。
  - ③ 三、六方晶系晶体:(10 $\bar{1}0$ )与[0001]; (10 $\bar{1}0$ )与[11 $\bar{2}0$ ]; (10 $\bar{1}0$ )与[10 $\bar{1}1$ ]; (0001)与[11 $\bar{2}0$ ]。
- 8) 何谓晶面的米氏符号? 某一晶面与 $X, Y, Z$ 轴上的截距系数分别为2, 2, 4, 请写出此晶面的米氏符号。
- 9) 在等轴晶系的晶体上,某一晶面与 $X, Y, Z$ 轴上的截距分别为2.5 mm, 5 mm,  $\infty$ , 试写出此晶面的米氏符号。

# 第六章 单形与聚形

## 本章概要

- 1) 单形概念及单形符号;146 种结晶单形的推导原理;47 种几何单形特征。
- 2) 一般形与特殊形、左形与右形、正形与负形、开形与闭形、定形与变形。
- 3) 聚形概念、单形聚合原则、聚形分析步骤。

对大量晶体形态对称性的研究表明,属于同一对称型的晶体可以具有完全不同的外形(图 6-1)。借助于晶面符号,我们已能标记各个晶面在晶体坐标系中的空间方位。但是,我们还缺乏一种描述晶面间相互关系的共同语言,也就是说,我们还没有解决由晶面所围成的各种不同几何形态(即晶体的外形或形态)的称谓问题(如图 6-1 中的 a,b,c 应分别称为立方体、八面体和六八面体)。这些问题将在本章加以解决。

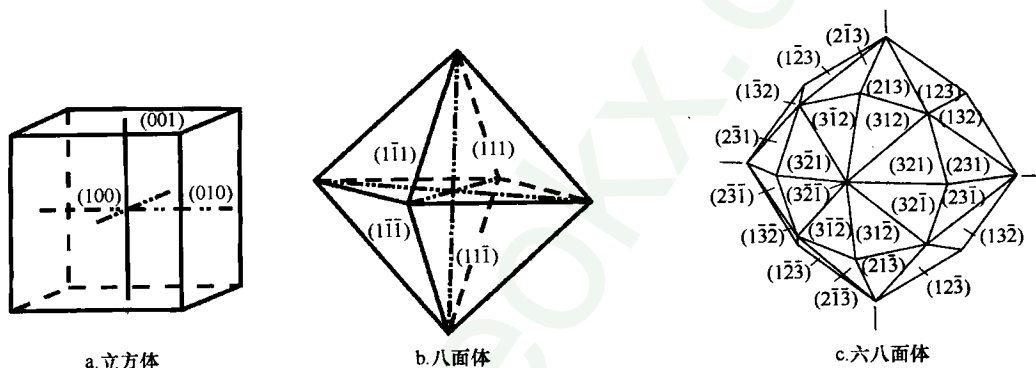


图 6-1 属于  $m3m$  对称型而呈不同形态的晶体

本章介绍的单形和聚形均属于晶体的理想形态。尽管实际晶体的形态更多地表现为“歪晶”,但基于面角守恒定律,通过测量和投影总能恢复其理想形态。因此,单形和聚形的学习是实际晶体形态研究的基础。

## 第一节 单 形

### 1. 单形的概念

单形 (simple form) 是由对称型中全部对称要素联系起来的一组晶面的组合。也就是说,单形是在一个晶体上,通过对所有宏观对称要素进行相应的对称操作,能够使一组晶面相互重复,这组晶面便构成一个单形。显然,这组晶面与相同对称要素(或晶轴)间的取向关系(平行、垂直或以某个角度相交)必然互相一致,且各晶面的其他性质如物理性质、晶面花纹及蚀象等也都彼此相同,理想情况下同一单形的所有晶面还应同形等大。图 6-1 中的立方体、八面体及六八面体便是借助  $m3m$  的对称操作而联系起来的 3 组晶面,每组晶面构成一个单形。由此看出,在同一对称型中,只要原始晶面与对称要素的空间关系不同就可以导出不同的单形。图 6-1 中立方体的所有晶面垂直四次轴,八面体的所有晶面垂直三次轴,而六八面体的晶面与任何对称要素均无特殊空间关系。

2. 单形符号

单形符号 ( simple form symbol)简称形号,是以简单的数字或字母表征单形中所有晶面空间取向的一种结晶学符号。单形符号是将单形中一个代表面的晶面指数用 $\{ \}$ 括起来获得的。

由单形概念可知,同一单形的所有晶面与结晶轴的关系是相同的,因此它们的晶面符号也具有共性。例如,图 6-1 中 3 个单形各自的晶面指数除了正负号和排列顺序不同外,其绝对值都是各自相同的。这样,我们就可以在同一单形内选择某一个晶面作为代表,用其符号变换为该单形的符号。如前述的立方体有 6 个晶面,选(100)为代表面,其单形符号便是 $\{100\}$ 。

以同一单形中任意一个晶面为原始面,都可将该单形的所有晶面推导出来,因此任意晶面都具有该单形的代表性。但为了表述规范,规定代表面的选择原则是单形中正指数最多的晶面,也即选择极射赤平投影图上第一象限内的晶面。具体选择顺序为先前、次右、后上,其结果是晶面指数  $h \geq k \geq l$ 。

例如:上述立方体 6 个晶面中,(100),(010),(001)都含正指数和零,但以(100)在最前面,符合  $h \geq k \geq l$ ,故选定其单形符号为 $\{100\}$ ;八面体上正指数最多的晶面为(111),故其形号为 $\{111\}$ (图 6-1a 和 b)。又如,六八面体中,具正指数的晶面有 6 个,但满足  $h \geq k \geq l$  的只有(321)(图 6-1c),所以六八面体的单形符号为 $\{321\}$ 。

3. 146 种结晶单形

(1) 单形的推导

根据单形的概念可知:若已知单形中的某一晶面与对称要素的方位关系,那么该晶体上的其他所有晶面便可以通过对称要素全部推导出来;在同一对称型中,已知晶面与对称要素的方位关系不同,推导出来的单形便不同;不同对称型中,由于对称要素的种类和数目不同,推导出来的单形也不同。

下面以斜方晶系的对称型  $mm2(L^22P)$  为例说明单形的推导过程。

对称型  $mm2(L^22P)$  中对称要素在空间的分布如图 6-2。该对称型的定向原则为:2 个对称面的法线分别为  $X$  轴和  $Y$  轴,唯一的 1 个二次轴为  $Z$  轴。其对称要素的极射赤平投影见图 6-3。图中各象限均由 2 个对称面的法线和 1 个二次轴的投影所围限,具对称上的等同性。各象限分别为投影图中的最小重复单位。因此,讨论原始晶面与对称要素的关系时只要考虑其在一个最小重复单位(这里为第一象限斜线部分)中的情况即可。

原始晶面与对称要素可能的相对位置只有图 6-3 中标为 1,2,3,4,5,6,7 号的 7 种情况。以下分别就各种情况介绍其单形的推导。

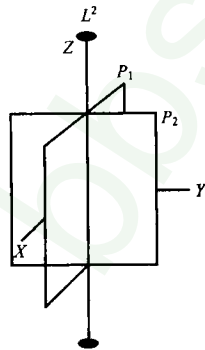


图 6-2 对称型  $mm2(L^22P)$  的定向与其对称要素的空间分布

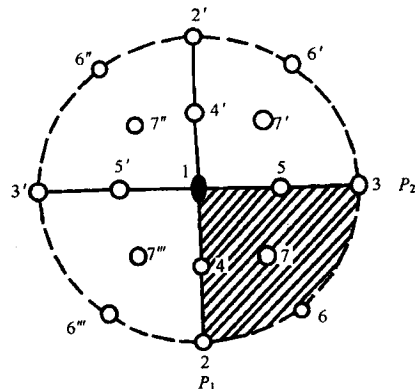


图 6-3 对称型  $mm2(L^22P)$  的极射赤平投影和单形推导图解

位置1 原始晶面(001)垂直于 $L^2$ 和 $2P$ 。通过 $L^2$ 和2个 $P$ 的作用不能产生新的晶面,原始晶面本身便构成1个单形——单面,单形符号 $\{001\}$ ,在图6-3中为1号晶面。

位置2 原始晶面(100)平行于 $L^2$ 和 $P_2[100]$ ( $P$ 的法线用晶棱符号表示,下同),而垂直于 $P_1[010]$ 。通过 $L^2$ 或 $P_2[100]$ 的作用产生了平行于原始面的新晶面( $\bar{1}00$ )。通过 $P_1[010]$ 的作用不再产生新的晶面,则原始面(100)和推出的新晶面( $\bar{1}00$ )共同构成1个单形——平行双面,其单形符号为 $\{100\}$ ,在图6-3中包含2和2'号晶面。

位置3 原始晶面(010)与对称要素之间的关系和位置2的情况类似,只是方位转动 $90^\circ$ ,推导结果也是由两个晶面(010)和( $0\bar{1}0$ )组成的平行双面 $\{010\}$ ,在图6-3中包含3和3'号晶面。

位置4 原始晶面( $h0l$ )与 $L^2$ 和 $P_2[100]$ 斜交,垂直于 $P_1[010]$ 。由于 $P_1[010]$ 的作用无效,而通过 $L^2$ 或 $P_2[100]$ 的作用产生1个和原始晶面相交的晶面( $\bar{h}0l$ ),这两个晶面共同组成了1个单形——双面 $\{h0l\}$ ,在图6-3中为4和4'号晶面。

位置5 与位置4类似,原始晶面( $0kl$ ),推导得到晶面( $0\bar{k}l$ ),其结果是相同名称的单形——双面 $\{0kl\}$ ,但与位置4的双面取向不同,在图6-3中包含5和5'号晶面。

位置6 原始晶面( $hk0$ )平行于 $L^2$ ,而与 $P_1$ 和 $P_2$ 均斜交,通过所有对称要素的作用得到另外3个晶面,即( $\bar{h}k0$ ),( $h\bar{k}0$ )和( $\bar{h}\bar{k}0$ ),这4个面组成的单形为斜方柱 $\{hk0\}$ ,在图6-3中包含6,6',6'',6'''等4个晶面。

位置7 原始晶面( $hkl$ )与 $L^2$ 和 $P_1$ 和 $P_2$ 都斜交,通过所有对称要素的作用,可以得到另外3个晶面,即( $\bar{h}kl$ ),( $h\bar{k}l$ )和( $\bar{h}\bar{k}l$ ),这4个面共同组成的单形为斜方单锥 $\{hkl\}$ ,在图6-3中包含7,7',7'',7'''等4个晶面。

由对称型 $mm2$ 导出的7个单形的形态见图6-4。其中,位置2导出的平行双面 $\{100\}$ 与位置3导出的平行双面 $\{010\}$ 仅方位不同,与结晶轴的关系相同,可归为一种结晶单形;而位置4导出的双面 $\{h0l\}$ 与位置5的双面 $\{0kl\}$ 也是与结晶轴关系相同仅方位不同,也可归为一种结晶单形。所以对称型 $mm2$ 的7个原始晶面最终共导出5种结晶单形。

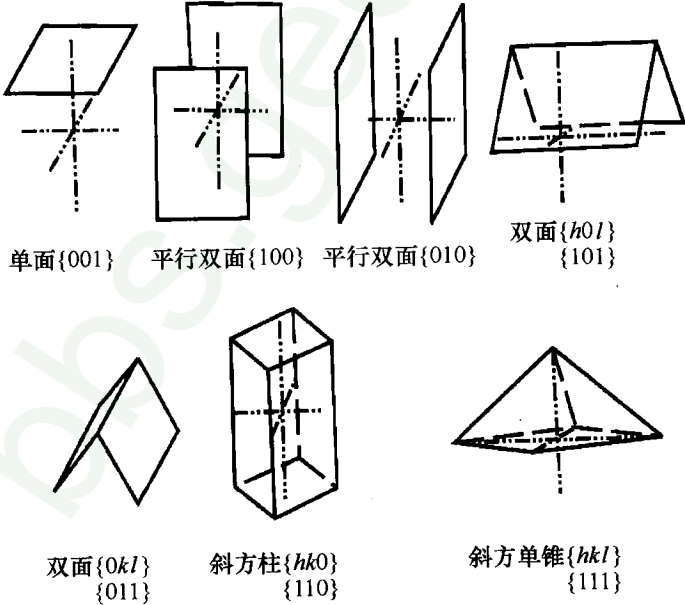


图6-4 对称型 $mm2(L^2 2P)$ 中导出的7个单形  
(据潘兆橐等,1993)

## (2) 各晶系结晶单形推导举例

按以上方法选择各晶系具有代表性的对称型对原始晶面进行推导。投影图的最小重复单位是图中的阴影部分(见图 6-5 至图 6-8)。

### 等轴晶系

六八面体晶类( $m\bar{3}m, 3L^4 4L^3 6L^2 9PC$ ) 其对称要素的赤平投影和晶轴选择如图 6-5。原始晶面与对称要素和晶轴的相对位置共有 7 种, 晶面投影点分别为 1(100)、2(111)、3(110)、4( $hk0$ )、5( $hkk$ )、6( $hhl$ )、7( $hkl$ ), 从而可依次导出 7 种单形: 立方体{100}、八面体{111}、菱形十二面体{110}、四六面体{ $hk0$ }、四角三八面体{ $hkk$ }、三角三八面体{ $hhl$ }和六八面体{ $hkl$ }。

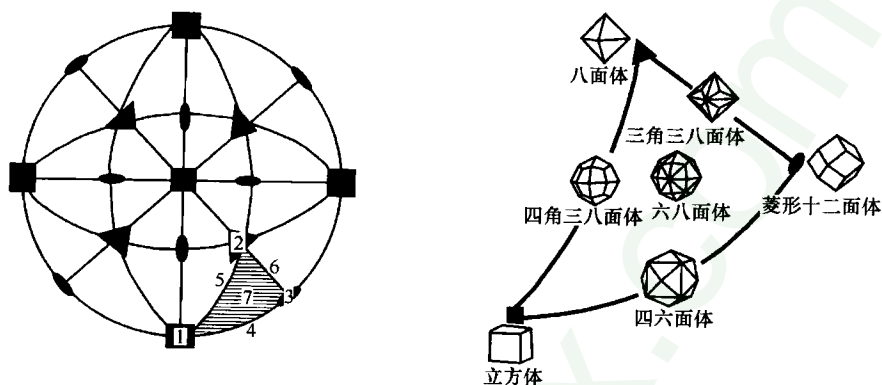


图 6-5 六八面体晶类( $m\bar{3}m, 3L^4 4L^3 6L^2 9PC$ )对称型及单形代表面赤平投影  
右图为左图阴影部分的放大

六四面体晶类( $\bar{4}3m, 3L^4 4L^3 6P$ ) 与六八面体晶类相比, 取消了相互垂直并分别平行(100)、(010)和(001)的 3 个对称面, 因此即使原始晶面位置相同、晶面符号相同, 但推导出的单形也不同(图 6-6)。形号为{100}、{110}、{ $hk0$ }单形仍为立方体、菱形十二面体和四六面体, 而形号为{111}、{ $hkk$ }、{ $hhl$ }、{ $hkl$ }单形, 分别为四面体、三角三四面体、四角三四面体、六四面体, 并均有正负形之分(详见本章下述单形其他分类)。

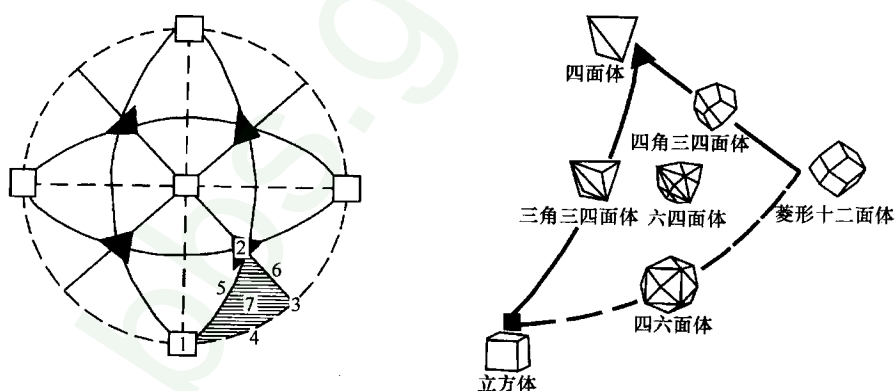


图 6-6 六四面体晶类( $\bar{4}3m, 3L^4 4L^3 6P$ )对称型及其单形的代表面赤平投影  
右图为左图阴影部分的放大

## 四方晶系

复四方双锥晶类( $4/mmm$ ) 本晶类对称要素和单形原始晶面的赤平投影如图6-7,单形原始晶面投影点有7种可能位置,它们的投影点分别为1(001),2(110),3(100),4( $hk0$ ),5( $hhl$ ),6( $h0l$ )和7( $hkl$ )。依次导出的单形为平行双面{001}、第一四方柱{110}、第二四方柱{100}、复四方柱{ $hk0$ }、第一四方双锥{ $hhl$ } (包括{111})、第二四方双锥{ $h0l$ } (包括{101})和复四方双锥{ $hkl$ }。其中二个四方柱为同一种结晶单形,二个四方双锥也如此。

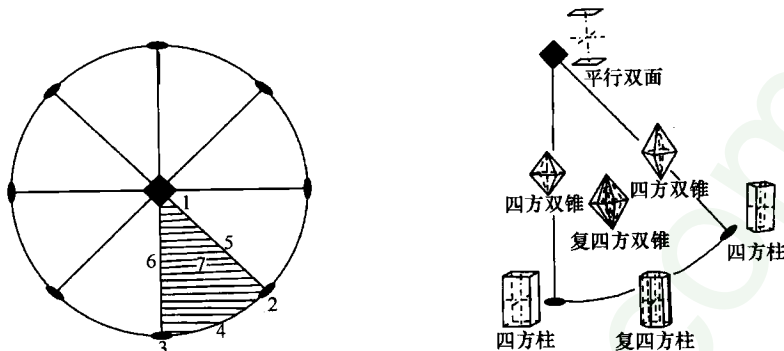


图6-7 复四方双锥晶类( $4/mmm$ )对称型及其单形的代表面赤平投影  
右图为左图阴影部分的放大

## 三方晶系及六方晶系

复六方双锥晶类( $6/mmm$ ) 对称要素的极射赤平投影见图6-8。单形原始面的7种投影位置是:1(0001),2( $10\bar{1}0$ ),3( $11\bar{2}0$ ),4( $hk\bar{i}0$ ),5( $h0hl$ ),6( $hh\bar{2}hl$ )和( $hk\bar{i}l$ ),可以推导出平行双面(原始晶面1)、2个六方双锥(原始晶面5和6)、复六方双锥(原始晶面7)、复六方柱(原始晶面4)、2个六方柱(原始晶面2和3)等7种可能的不同形号的单形。

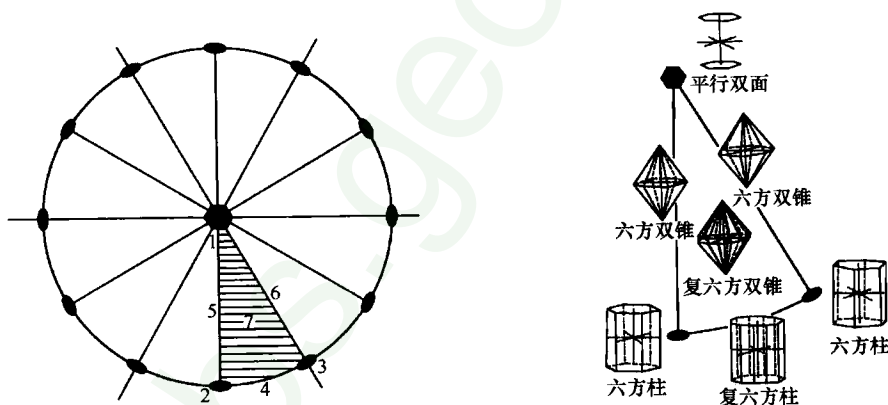


图6-8 复六方双锥晶类( $6/mmm$ )对称要素及单形代表面赤平投影  
右图为左图阴影部分的放大

## 斜方晶系

对属于  $mmm$  和  $222$  两个对称型的晶体,符合晶体定向原则的定向方法可以有6种。如图6-9所示,同样一个斜方晶胞,可以出现6种不同的定向。定向不同, $a, b, c$  相互颠倒,轴率不同,晶面符号各异。以重晶石为例,其定向方法和形号有两种(图6-10),在第一种定向(a)中,轴率  $a:b:c = 1.6304:1:1.3136$ ;在第二种定向(b)中,轴率  $a:b:c = 1.2412:1:0.7612$ 。两种定向方

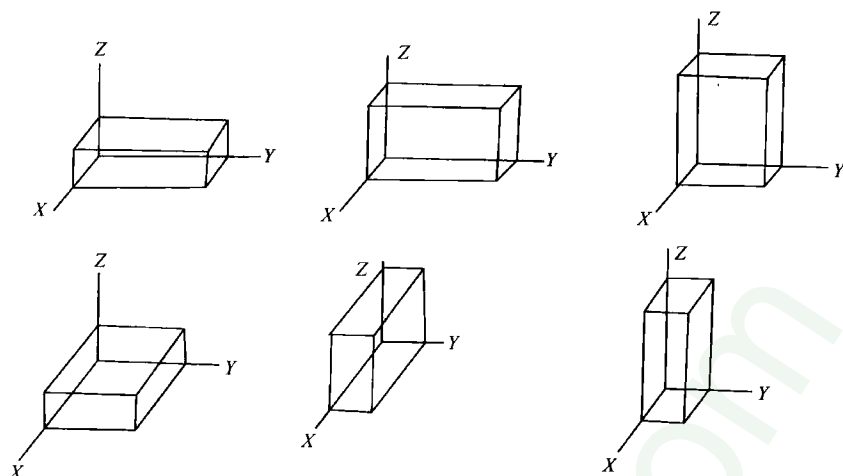


图 6-9 斜方晶系的 6 种定向方式

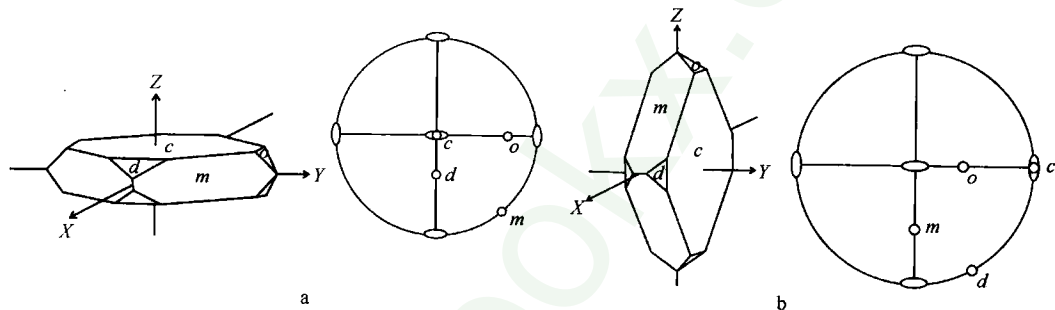


图 6-10 重晶石的两种定向及晶体投影

a.  $c$  平行双面  $\{001\}$ ,  $m$  斜方柱  $\{210\}$ ,  $d$  斜方柱  $\{101\}$ ,  $o$  斜方柱  $\{011\}$ ; b.  $c$  平行双面  $\{010\}$ ,  $m$  斜方柱  $\{201\}$ ,  $d$  斜方柱  $\{110\}$ ,  $o$  斜方柱  $\{011\}$

式中,单形名称不变,但单形符号变化,在第一种定向(a)中单形的符号为: $c$  平行双面  $\{001\}$ 、 $m$  斜方柱  $\{210\}$ 、 $d$  斜方柱  $\{101\}$ 、 $o$  斜方柱  $\{011\}$ ,在第二种定向(b)中单形符号为: $c$  平行双面  $\{010\}$ 、 $m$  斜方柱  $\{201\}$ 、 $d$  斜方柱  $\{110\}$ 、 $o$  斜方柱  $\{011\}$ 。

### 单斜和三斜晶系

单斜晶系的单形及形号在各晶类的分布见表 6-1。在  $L^2$  和  $P$  对称型中,有多种方位的单面、双面和平行双面,因只有一个  $L^2$  或  $P$ ,推导出来的一个单形的晶面数最多只有两个,无斜方柱;在  $L^2PC$  对称型中因多个对称要素协同对称操作,出现了斜方柱  $\{hkl\}$ ,  $\{0kl\}$ ,  $\{hk0\}$  和平行双面  $\{h0l\}$ ,  $\{100\}$ ,  $\{010\}$ ,  $\{001\}$ 。

### 三斜晶系

因对称型为  $L^1$  和  $C$ ,出现的单形只有单面和平行双面。

#### (3) 146 种结晶单形的导出

按以上方法对 32 个对称型中的单形逐一进行推导,最终可得出 146 种结晶学上不同的单形,如表 6-1 至表 6-5 中所列。表中单形名称前面的数字为 146 种结晶单形的序号,单形名称后面括号内的数字是组成该单形的晶面数。

表 6-1 三斜晶系及斜方晶系的单形

形 号	三斜晶系的单形		单斜晶系的单形		斜方晶系的单形				
	$1(L^1)$	$\bar{1}(C)$	$2(L^2)$	$m(P)$	$2/m(L^2PC)$	$222(3L^2)$	$mm(L^22P)$	$mmm(3L^23PC)$	
$\{hkl\}$	1. 单面(1)	2. 平行双面(2)	3. 轴双面(2)	6. 反映双面(2)	9. 斜方柱(4)	12. 斜方四面体(2)	15. 斜方单锥(4)	20. 斜方双锥(4)	
$\{0kl\}$	单面(1)	平行双面(2)	轴双面(2)	反映双面(2)	斜方柱(4)	13. 斜方柱(4)	16. 反映双面(2)	21. 斜方柱(4)	
$\{h0l\}$	单面(1)	平行双面(2)	4. 平行双面(2)	7. 单面(1)	10. 平行双面(2)	斜方柱(4)	反映双面(2)	斜方柱(4)	
$\{hk0\}$	单面(1)	平行双面(2)	轴双面(2)	反映双面(2)	斜方柱(4)	斜方柱(4)	17. 斜方柱(4)	斜方柱(4)	
$\{100\}$	单面(1)	平行双面(2)	平行双面(2)	单面(1)	平行双面(2)	14. 平行双面(2)	18. 平行双面(2)	22. 平行双面(2)	
$\{010\}$	单面(1)	平行双面(2)	5. 单面(1)	8. 平行双面(2)	11. 平行双面(2)	平行双面(2)	平行双面(2)	平行双面(2)	
$\{001\}$	单面(1)	平行双面(2)	平行双面(2)	单面(1)	平行双面(2)	平行双面(2)	19. 单面(1)	平行双面(2)	

表 6-2 四方晶系的单形

形 号	$4(L^4)$	$42(L^42L^2)$	$4/m(L^4PC)$	$4mm(L^44P)$	$4/nmm(L^44L^25PC)$	$4(L_4^4)$	$\bar{4}2m(L_4^42L^22P)$
$\{hkl\}$	23. 四方单锥(4)	26. 四方偏方面体(8)	31. 四方双锥(8)	34. 复四方单锥(8)	39. 复四方双锥(16)	44. 四方四面体(4)	47. 复四方偏三角面体(8)
$\{hhl\}$	四方单锥(4)	27. 四方双锥(8)	四方双锥(8)	35. 四方单锥(4)	40. 四方双锥(8)	四方四面体(4)	48. 四方四面体(4)
$\{h0l\}$	四方单锥(4)	四方双锥(8)	四方双锥(8)	四方单锥(4)	四方双锥(8)	四方四面体(4)	49. 四方双锥(8)
$\{hk0\}$	24. 四方柱(4)	28. 复四方柱(8)	32. 四方柱(4)	36. 复四方柱(8)	41. 复四方柱(8)	45. 四方柱(4)	50. 复四方柱(8)
$\{110\}$	四方柱(4)	29. 四方柱(4)	四方柱(4)	37. 四方柱(4)	42. 四方柱(4)	四方柱(4)	51. 四方柱(4)
$\{100\}$	四方柱(4)	四方柱(4)	四方柱(4)	四方柱(4)	四方柱(4)	四方柱(4)	52. 四方柱(4)
$\{001\}$	25. 单面(1)	30. 平行双面(2)	33. 平行双面(2)	38. 单面(1)	43. 平行双面(2)	46. 平行双面(2)	53. 平行双面(2)

表 6-3 三方晶系的单形

形 号	$3(L^3)$	$32(L^33L^2)$	$3m(L^33P)$	$\bar{3}(L^3C)$	$\bar{3}m(L^33L^23PC)$
$\{hk\bar{l}\}$	54. 三方单锥(3)	57. 三方偏方面体(6)	64. 复三方单锥(6)	71. 菱面体(6)	74. 复三方偏三角面体(12)
$\{h0\bar{l}\}$	三方单锥(3)	58. 菱面体(6)	65. 三方单锥(3)	菱面体(6)	75. 菱面体(6)
$\{hh\bar{2}hl\}$	三方单锥(3)	59. 三方双锥(6)	66. 三方单锥(6)	菱面体(6)	76. 三方双锥(12)
$\{hk\bar{2}0\}$	55. 三方柱(3)	60. 复三方柱(6)	67. 复三方柱(6)	菱面体(6)	77. 复三方柱(12)
$\{10\bar{1}0\}$	三方柱(3)	61. 三方柱(6)	68. 三方柱(3)	三方柱(6)	78. 三方柱(6)
$\{11\bar{2}0\}$	三方柱(3)	62. 三方柱(3)	69. 三方柱(6)	三方柱(6)	79. 三方柱(6)
$\{0001\}$	56. 单面(1)	63. 平行双面(2)	70. 单面(1)	三方柱(6)	80. 平行双面(2)

表 6-4 六方晶系的单形

形 号	$6(L^6)$	$62(L^66L^2)$	$6m(L^6PC)$	$6mm(L^66P)$	$6/mmm(L^66L^27PC)$	$\bar{6}(L_1^6)$	$\bar{6}m2(L_1^63L^23P)$
$\{hk\bar{u}\}$	81. 六方单锥(6)	84. 六方偏方面体(12)	89. 六方双锥(12)	92. 复六方单锥(12)	97. 复六方双锥(24)	102. 三方双锥(6)	105. 复三方双锥(12)
$\{h0\bar{h}l\}\{0k\bar{k}l\}$	六方单锥(6)	85. 六方双锥(12)	六方双锥(12)	93. 六方单锥(6)	98. 六方双锥(12)	三方双锥(6)	106. 三方双锥(6)
$\{hh2hl\}\{2k\bar{k}hl\}$	六方单锥(6)	六方双锥(12)	六方双锥(12)	六方单锥(6)	六方双锥(12)	三方双锥(6)	107. 六方双锥(12)
$\{hk\bar{0}\}$	82. 六方柱(6)	86. 复六方柱(12)	90. 六方柱(6)	94. 复六方柱(12)	99. 复六方柱(12)	103. 三方柱(3)	108. 复三方柱(6)
$\{10\bar{1}0\}\{01\bar{1}0\}$	六方柱(6)	87. 六方柱(6)	六方柱(6)	95. 六方柱(6)	100. 六方柱(6)	三方柱(3)	109. 三方柱(3)
$\{11\bar{2}0\}\{2\bar{1}\bar{1}0\}$	六方柱(6)	六方柱(6)	六方柱(6)	六方柱(6)	六方柱(6)	三方柱(3)	110. 六方柱(6)
$\{0001\}$	83. 单面(1)	88. 平行双面(2)	91. 平行双面(2)	96. 单面(1)	101. 平行双面(2)	104. 平行双面(2)	111. 平行双面(2)

表 6-5 等轴晶系的单形

形 号	$23(3L^24L^3)$	$m3(3L^24L^3PC)$	$\bar{4}3m(3L_1^44L^36P)$	$43(3L^44L^36L^2)$	$m3m(3L^44L^36L^29PC)$
$\{hkl\}$	112. 五角三四面体(12)	119. 偏方复十二面体(24)	126. 六四面体(24)	133. 五角三八面体(24)	140. 六八面体(48)
$\{hhl\}$	113. 四角三四面体(12)	120. 三角三四面体(24)	127. 四角三四面体(12)	134. 三角三四面体(24)	141. 三角三四面体(24)
$\{hkk\}$	114. 三角三四面体(12)	121. 四角三四面体(24)	128. 三角三四面体(12)	135. 四角三四面体(24)	142. 四角三四面体(24)
$\{111\}$	115. 四面体(4)	122. 八面体(8)	129. 四面体(4)	136. 八面体(8)	143. 八面体(8)
$\{hk0\}$	116. 五角十二面体(12)	123. 五角三四面体(12)	130. 四四面体(24)	137. 四四面体(24)	144. 四四面体(24)
$\{110\}$	117. 菱形十二面体(12)	124. 菱形十二面体(12)	131. 菱形十二面体(12)	138. 菱形十二面体(12)	145. 菱形十二面体(12)
$\{100\}$	118. 立方体(6)	125. 立方体(6)	132. 立方体(6)	139. 立方体(6)	146. 立方体(6)

注:单形名称前的数字为 146 种结晶单形的序号;小括号内数字为单形的晶面数目。

结晶单形的确定,既要考虑单形的几何形态,又要考虑单形的对称性及与对称要素的取向关系(平行、垂直或以某个角度相交)。例如,422( $L^4 4L^2$ )对称型中的四方柱 $\{110\}$ 和四方柱 $\{100\}$ ,它们在同一对称型中出现即对称性相同,而且与对称要素的取向关系相同,即都与 $L^4$ 和一个 $L^2$ 平行、与一个 $L^2$ 垂直、与两个 $L^2$ 等角度相交(图6-11a),因此两个四方柱属于同一种结晶单形。 $\bar{4}2m(L^4 2L^2 2P)$ 对称型中的两个四方柱 $\{110\}$ 和 $\{100\}$ 则不然,它们与对称要素的取向关系不同,四方柱 $\{100\}$ 与 $L^4$ 和一个 $L^2$ 平行、与另一个 $L^2$ 垂直、与两个 $P$ 等角度相交,四方柱 $\{110\}$ 与 $L^4$ 和一个 $P$ 平行、与另一个 $P$ 垂直、与两个 $L^2$ 等角度相交(图6-11b),因此它们不属于一种结晶单形而是两种。 $\bar{3}m$ 对称性中的六方柱 $\{10\bar{1}0\}$ 和六方柱 $\{11\bar{2}0\}$ 不属于同一种结晶单形的道理与上述相同,即单形与对称要素关系不同(图6-11c)。

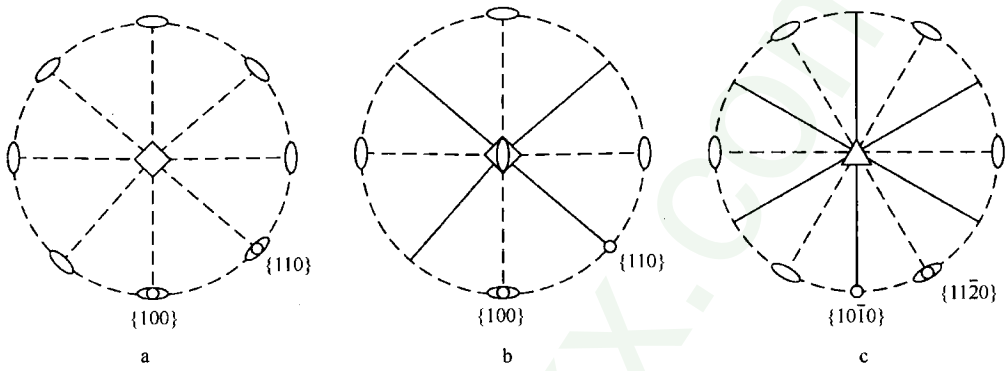


图6-11 结晶单形与对称型的关系

a—422 对称型中属于同一结晶单形的两个四方柱 $\{100\}$ 和 $\{110\}$ ; b— $\bar{4}2m$  对称型中属于两个结晶单形的四方柱 $\{110\}$ 和四方柱 $\{100\}$ ; c— $\bar{3}m$  对称性中属于两个结晶单形的六方柱 $\{10\bar{1}0\}$ 和六方柱 $\{11\bar{2}0\}$

由此可见,名称相同的单形即使是在同一对称型中也不意味着必然属于同一种结晶单形。不同晶族晶系及不同对称型中出现的名字相同的单形,因其对称程度不同而不属于同种结晶单形。例如,立方体在等轴晶系的5个对称型中都有出现,如仅从外形上看,它们都应该具有 $m\bar{3}m(3L^4 4L^3 6L^2 9PC)$ 的对称,但从结晶学意义上考虑,如考虑其外部的晶面花纹、物理性质、内部质点排列等的对称性,便表现出完全不同的特征。如萤石( $m\bar{3}m$ )和黄铁矿( $m\bar{3}$ )的立方体(图6-12),它们晶面上的条纹方向表明了各自的真实对称。即使黄铁矿晶体表面没有晶面花纹,其内部质点也呈 $m\bar{3}$ 对称(空间群国际符号可以充分反映,见后续)。

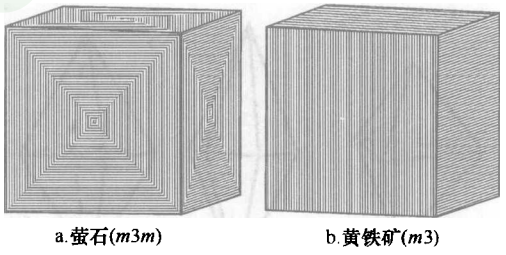


图6-12 两种对称型不同的立方体 (据罗谷风,1985)

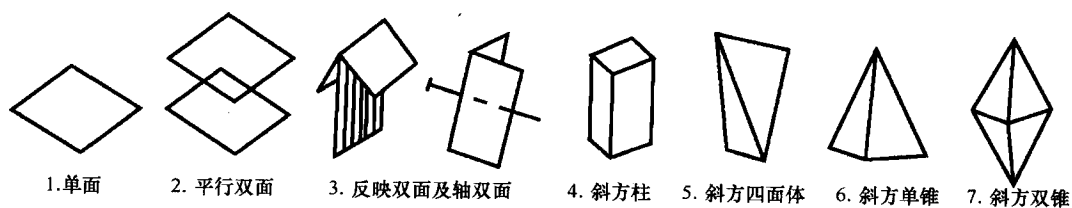
4. 47种几何单形

如前所述,从结晶学意义上可推导出146种不同单形。但是,如果只考虑组成单形的晶面数目、各晶面间的几何关系以及单形单独存在时的形态等几何性质,那么146种结晶单形可以归并为几何性质不同的47种几何单形。

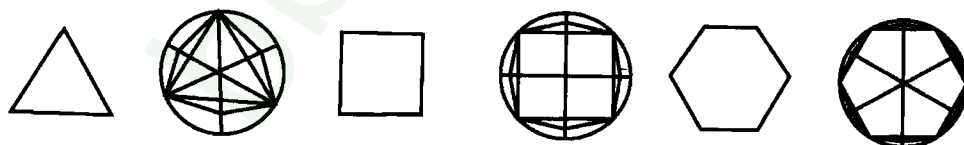
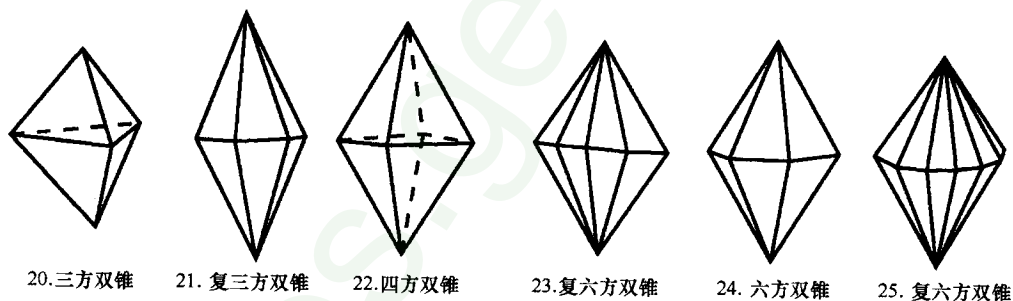
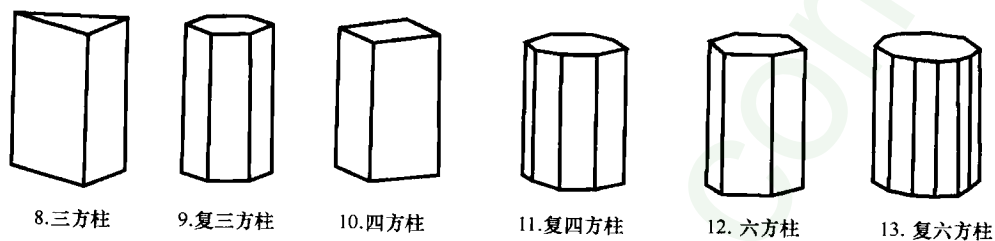
(1) 47种几何单形的特征

47种几何单形见图6-13。对于一个单形的描述,通常包括晶面的形状、数目、相互关系、晶面与对称要素的相对位置以及单形横切面的形状等。当晶体的对称型和坐标系统确定后,晶面

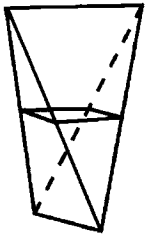
# I. 低级晶族的单形



# II. 中级晶族的单形



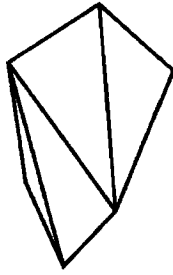
各种柱锥的横切面



26. 四方四面体



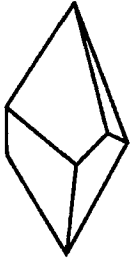
27. 菱面体



28. 复四方偏三角面体

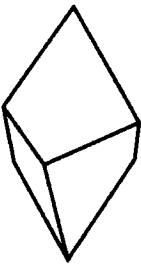


29. 复三方偏三角面体

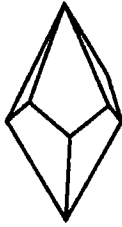


左形

30. 三方偏方面体

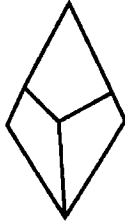


右形



左形

31. 四方偏方面体



右形



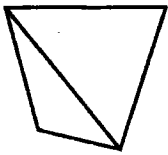
左形

32. 六方偏方面体

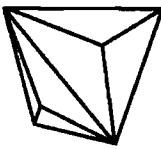


右形

### III. 高级晶族的单形



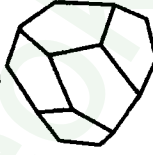
33. 四面体



34. 三角三四面体

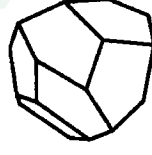


35. 四角三四面体

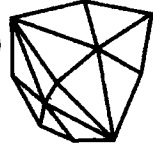


左形

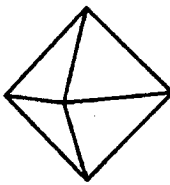
36. 五角三四面体



右形



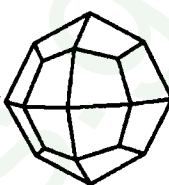
37. 六四面体



38. 八面体



39. 三角三八面体

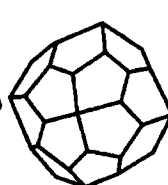


40. 四角三八面体

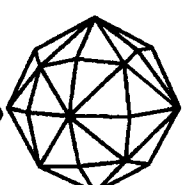


左形

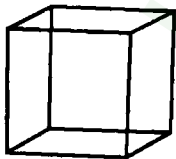
41. 五角三八面体



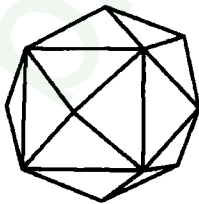
右形



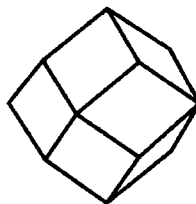
42. 六八面体



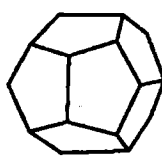
43. 立方体



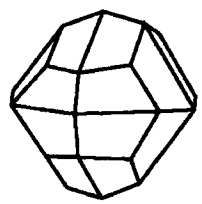
44. 四六面体



45. 菱形十二面体



46. 五角十二面体



47. 偏方复十二面体

图 6-13 47 种几何单形

符号(单形符号)是识别单形最重要的依据。为了掌握 47 种几何单形的形态特点,下面将其作简略归类分析。

中、低级晶族的单形可分如下 6 类:

**面类** 包括单面、平行双面和双面。平行双面由一对互相平行的晶面组成。双面由两个相交的晶面组成(若二晶面由二次轴  $L^2$  相联系时,称轴双面;若由对称面  $P$  相联系时,称反映双面)。

**柱类** 包括斜方柱、三方柱、四方柱、六方柱、复三方柱、复四方柱和复六方柱。其中,复三方柱、复四方柱和复六方柱的晶面交角是隔角相等。

**单锥类** 包括斜方单锥、三方单锥、四方单锥、六方单锥、复三方单锥、复四方单锥、复六方单锥。

**双锥类** 包括斜方双锥、三方双锥、四方双锥、六方双锥、复三方双锥、复四方双锥、复六方双锥。

上述柱类、单锥类和双锥类单形的横截面特点如图 6-13 所示,要特别注意复三方、复四方和复六方的柱、锥类单形的横截面特点。

**面体类** 包括斜方四面体、四方四面体、菱面体、复三方偏三角面体、复四方偏三角面体。这些单形的特点是:上部的面与下部的面错开分布,且上部(或下部)晶面恰好在下部(或上部)两晶面正中间,没有与  $Z$  轴垂直的对称面(没有水平对称面,这一点与双锥类不同),除斜方四面体外,都有包含高次轴的直立对称面。

**偏方面体类** 包括三方偏方面体、四方偏方面体、六方偏方面体。偏方面体类与面体类单形都呈上下面错开状分布,但偏方面体类单形上部晶面与下部晶面错开的角度左右不等,故不存在包含高次轴的直立对称面,也使之有左、右形之分。

高级晶族的单形分为如下 3 类:

**四面体类** 包括四面体、三角三四面体、四角三四面体、五角三四面体和六四面体 5 个单形。四面体,由 4 个等边三角形晶面所组成,晶面与  $L^3$  垂直;晶棱的中点出露  $L^4$ 。三角三四面体,犹如四面体的每一个晶面突起分为 3 个等腰三角形晶面而成。四角三四面体,犹如四面体的每一个晶面突起分为 3 个四角形晶面而成,四角形的 4 个边两两相等。五角三四面体,犹如四面体的每一晶面突起分为 3 个偏五角形晶面而成。六四面体,犹如四面体的每一个晶面突起分为 6 个不等边三角形而成。

**八面体类** 包括八面体、三角三八面体、四角三八面体、五角三八面体和六八面体 5 个单形。与四面体类的情况相似,八面体由 8 个等边三角形晶面所组成,晶面垂直于  $L^3$ 。设想八面体的每一个晶面突起平分 3 个晶面,据晶面的形状可分别形成三角三八面体、四角三八面体、五角三八面体。而设想八面体的一个晶面突起平分 6 个不等边三角形则可以形成六八面体。

**立方体类** 包括立方体、四六面体、五角十二面体、偏方复十二面体、菱形十二面体等 5 个单形。立方体,由两两相互平行的 6 个正四边形晶面所组成,相邻晶面间均以直角相交。四六面体,设想立方体的每个晶面突起平分 4 个等腰三角形晶面,则这样的 24 个晶面组成了四六面体。五角十二面体,设想立方体每个晶面突起平分 5 个等腰三角形晶面,则这样的 12 个晶面组成五角十二面体。偏方复十二面体,设想五角十二面体的每个晶面再突起平分 4 个等腰三角形晶面,则这样的 24 个晶面组成偏方复十二面体。菱形十二面体,由 12 个菱形晶面所组成,晶面两两平行,相邻晶面间的交角为  $90^\circ$  与  $120^\circ$ 。

以上各单形的描述是从组成单形的晶面几何形态、与对称要素的空间方位,以及在几何形态方面某些单形间的关系进行的。这些单形在与结晶轴间的空间方位上存在密切的联系,主要表现在晶面与晶轴关系的量变转化为质变,即从一种单形转化为另一种单形,这可以从单形符号的指数值变化上得到反映。图 6-14 所示等轴晶系  $m\bar{3}m$  对称型中各单形间的关系就十分典型。我们在学习单形时要注意把握其规律性。

(2) 47 种几何单形在各晶系中的分布

在 47 种几何单形中,共 15 种属高级晶族所特有,25 种为中级晶族所特有,5 种为低级晶族

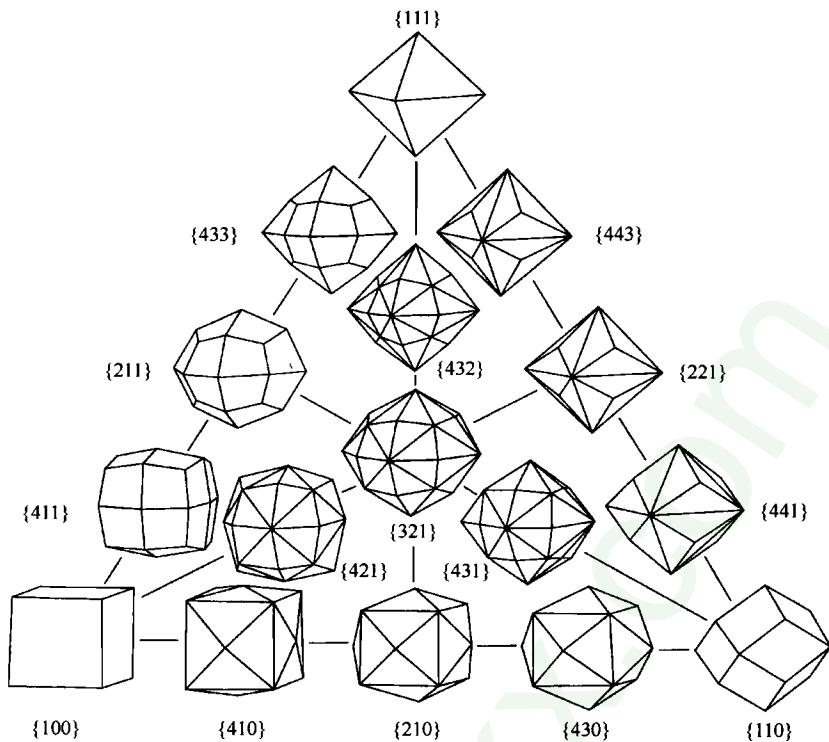


图 6-14 等轴晶系  $m\bar{3}m$  对称型中各单形间的关系  
(据南京大学地质学系岩矿教研室, 1978)

所特有, 另有 2 种在中级和低级晶族中均可出现(表 6-6)。

表 6-6 47 种几何单形在各晶族、晶系中的分布

晶族、晶系	面类	柱类	锥类		面体、偏方面体
			单锥	双锥	
三斜晶系	单面、平行双面				
单斜晶系	单面、双面 平行双面	斜方柱			
斜方晶系	单面、双面 平行双面	斜方柱	斜方单锥	斜方双锥	斜方四面体
四方晶系	单面 平行双面	四方柱 复四方柱	四方单锥 复四方单锥	四方双锥 复四方双锥	四方四面体 四方偏方面体 复四方偏三角面体
三方晶系	单面 平行双面	三方柱 复三方柱 六方柱 复六方柱	三方单锥 复三方单锥 六方单锥	三方双锥 六方双锥	菱面体 三方偏方面体 复三方偏三角面体
六方晶系	单面 平行双面	六方柱 复六方柱 三方柱 复三方柱	六方单锥 复六方单锥	六方双锥 复六方双锥 三方双锥 复三方双锥	六方偏方面体
等轴晶系	四面体、三角三四面体、四角三四面体、五角三四面体、六四面体、八面体、三角三八面体、四角三八面体、五角三八面体、六八面体、立方体、菱形十二面体、五角十二面体、偏方复十二面体、四六面体				

几何单形在各晶族晶系中的分布有明显的规律性:

- 1) 双面和名称中带有“斜方”的单形仅在低级晶族中出现。
- 2) 单面和平行双面既在低级晶族中出现,又可以在中级晶族各晶系中出现,但不能出现在高级晶族中。
- 3) 名称中带有“四方”的单形,仅在四方晶系中出现。
- 4) 在三方晶系中可以出现名称带有“六方”的单形,在六方晶系中可以出现名称带有“三方”的单形;有些单形仅限于三方或六方晶系,如菱面体仅出现在三方晶系。
- 5) 等轴晶系的单形仅在本晶系中出现。

掌握关于单形在各晶族晶系中分布的规律性,是学习有关聚形章节的重要基础。

## 5. 单形的分类

### (1) 特殊形和一般形

凡是单形晶面垂直或平行于某对称要素,或者与相同的对称要素以等角度相交,这种单形被称为特殊形(special form);反之,若单形晶面既不与任何对称要素垂直或平行(等轴晶系中的一般形有时可平行于三次轴的情况除外),也不与相同的对称要素以等角度相交,这种单形称为一般形(general form)。

一个对称型中只有1个一般形,该一般形的原始晶面位于对称型赤平投影图中最小重复单位(似三角形)内非角顶或边线的部位。尽管某个对称型的一般形可能与另一个对称型中某个特殊形的几何形态相同,但每个对称型的一般形都是不同的,所以一般形可作为相应对称型所有单形的代表。32个晶类的名称就是以相应对称型中一般形的名称来命名的。表6-1至表6-5中每个对称型对应第一列的单形即为该对称型的一般形。一般形的形号都是 $\{hkl\}$ 或 $\{hkil\}$ 。

### (2) 左形和右形

形态类同,空间取向相反的两个单形即为晶体的左形(left-hand form)和右形(right-hand form)。左右形互为镜像,但不能借助于旋转或反伸操作使之重合。

根据单形的几何特征可以区分左右形,如:对于中级晶族的3个偏方面体,以上部晶面的两个不等长的晶棱为判据,长晶棱在左边者为左形,在右边则为右形。五角三四面体和五角三八面体的左右形也可从外形加以区分(图6-13)。

从结构的对称性来看,仅由对称轴构成的对称型中所有单形都有左右形之分。

### (3) 正形和负形

两个相同的单形若取向不同,但能借助于旋转操作彼此重合,则两者互为正形和负形(positive form and negative form)。图6-15和图6-16分别表示四面体和五角十二面体的正形和负形,它们的正形相当于负形旋转了 $90^\circ$ 。

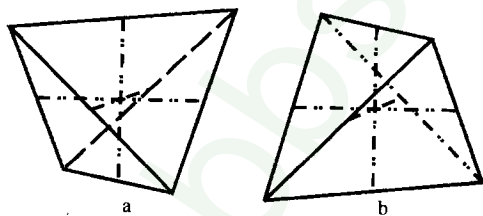


图6-15 四面体的正形(a)和负形(b)

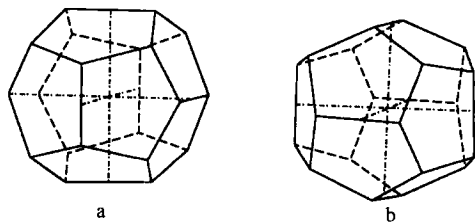


图6-16 五角十二面体正形(a)和负形(b)

互为正、负形的两个单形可以出现在同一晶体上(即形成聚形)。例如,一个四面体正形与一个四面体负形相聚,当它们发育的晶面大小相等时,这个晶体呈现假八面体形态,也呈现假的 $m\bar{3}m$ 对称。正形与负形的划分只对几何单形有意义。

#### (4) 开形和闭形

所有晶面可以封闭一定空间的单形称为闭形(closed form),反之称开形(open form),各种双锥和等轴晶系的全部单形都是闭形,平行双面、各种柱均为开形。闭形和开形的划分只对几何单形有意义。

#### (5) 定形和变形

晶面间角度恒定的单形称为定形(constant form),反之为变形(various form)。47种几何单形中,单面、平行双面、三方柱、四方柱、六方柱、四面体、八面体、菱形十二面体和立方体等9种属于定形,其余皆为变形。如果某种单形形号中的指数为确定的数值,如 $\{111\}$ , $\{100\}$ , $\{110\}$ 等,该种单形为定形,若某种单形形号中的指数为变数如 $\{hkl\}$ , $\{h k 0\}$ , $\{h k k\}$ 等,则该种单形为变形(图6-17)。定形的赤平投影点应位于最小重复单位(似三角形)的3个角顶,即投影点是固定的;相反,变形的投影点则位于最小重复单位的3条边与边线内部。定形与变形的划分也只对几何单形有意义。

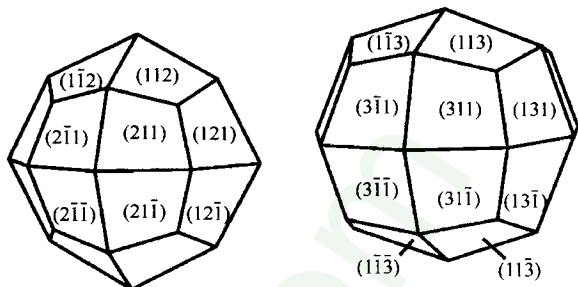


图6-17 四角三八面体 $\{hkk\}$ 变形的晶面符号比较  
(据潘兆麟等,1993)

## 第二节 聚 形

### 1. 聚形概念

理想的晶质单体(一个晶体的颗粒)是封闭的凸几何多面体。单形中的开形不能围限一定的空间,在晶体中不能单独出现,即使是闭形,在实际晶体中也常常和其他单形组合起来,共同构成封闭的几何多面体。由两个或两个以上单形按照一定对称规律组合起来构成的晶体的几何多面体便是聚形(combination form)。

图6-18和图6-19分别表示了四方柱和四方双锥、立方体和菱形十二面体组成的聚形,粗线为单形聚合后的形态。图6-20是矿物橄榄石常见的聚形晶。

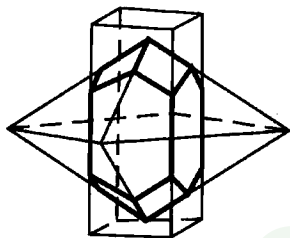


图6-18 四方柱和  
四方双锥聚形

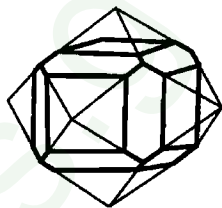


图6-19 立方体和  
菱形十二面体聚形

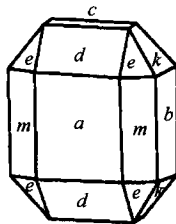


图6-20 橄榄石晶体形态( $a, b, c$ 为平行双面; $d, k, m$ 为斜方柱; $e$ 为斜方双锥)

### 2. 单形聚合的原则

单形的聚合不是任意的,能够在同一对称型中出现的结晶单形才能相聚。显然,组成聚形的所有单形的对称型,都应当与该聚形的对称型一致。需要特别注意的是,这里的单形都是指结晶单形。

### 3. 聚形的几何特点

**晶面形态** 在聚形中,各单形的晶面数目和晶面间的相对位置没有变化,但由于多个单形

之间的相互切割,使晶面的大小形状与原来独立单形相比可能会有变化。因此,在聚形中不能仅仅根据晶面形状判断其单形名称。

**单形数目** 在每一个对称型中,可能出现的单形种数不超过 7 种,但在一个聚形上可能出现的单形个数是无限制的,可以有两个或几个同种类的单形同时存在。

**正形和负形的聚合** 在一个聚形中可以出现指数绝对值完全对应相等而取向不同的两个相同的单形,这时的聚形便是由一个正形和一个负形所组成(图 6-21 和图 6-22)。

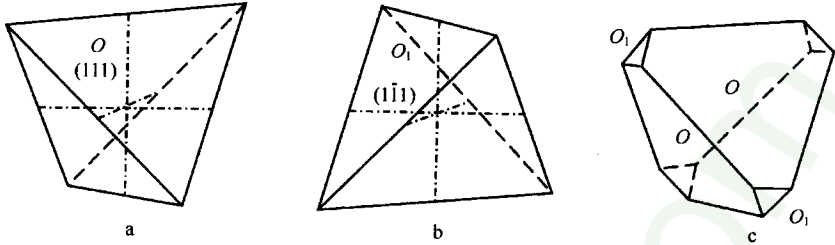


图 6-21 四面体正形(a)和负形(b)的聚合(c)  
(据罗谷风,1985)

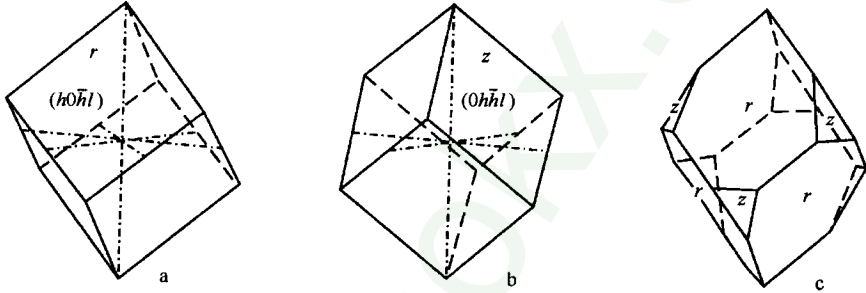


图 6-22 菱面体正形(a)和负形(b)的聚合(c)  
(据罗谷风,1985)

#### 4. 聚形分析

由于组成聚形的每个单形必定是能够在同一对称型中出现的,因此确定了对称型便确定了组成聚形的单形种类的范围。理想状态下,同一单形的各个晶面一定同形等大,不同单形的晶面形状大小绝不相同。因此,有多少单形相聚,聚形上就会出现多少种不同形状和大小的晶面。换言之,聚形上晶面种类的数目就是组成该聚形的单形种数。所以,分析一个聚形由何种单形组成,可根据该聚形的对称型、不同形状大小的晶面数目、同种晶面的数目和空间关系、晶面符号以及假想某种晶面扩展延伸等综合进行。

现以图 6-20 中橄榄石晶体形态图为例,说明聚形分析的具体步骤:

1) 对称型和晶系的确定:它所属对称型为  $3L^23PC(mmm)$ ,为斜方晶系,由此判断该对称型中可能出现的单形种类有平行双面、斜方柱和斜方双锥(见表 6-1)。

2) 晶体定向:根据斜方晶系的定向原则,选择 3 个  $L^2$  分别作为  $X, Y, Z$  轴。

3) 确定聚形上不同晶面种数:晶体上具有  $a, b, c, d, e, m, k$  等 7 种不同的晶面,因而可知它有相应的 7 个单形。

4) 单形名称和形号的确定:在已知晶系、定向和晶体常数基础上,根据每个单形晶面数目和相对位置定出上述 7 个单形的名称和形号,即 a. 平行双面  $\{100\}$ , b. 平行双面  $\{010\}$ , c. 平行双

面 $\{001\}$ ,  $d$ . 斜方柱 $\{h0l\}$ ,  $e$ . 斜方双锥 $\{hkl\}$ ,  $m$ . 斜方柱 $\{hk0\}$ ,  $k$ . 斜方柱 $\{0kl\}$ 。

5) 根据各单形晶面的数目、晶面间的相互关系以及想象地使晶面扩展相交后单形的形状, 进一步确认上述单形的名称。

### 5. 矿物聚形晶举例

以下列举不同晶系或晶类的若干矿物聚形晶如图 6-23 至图 6-28。

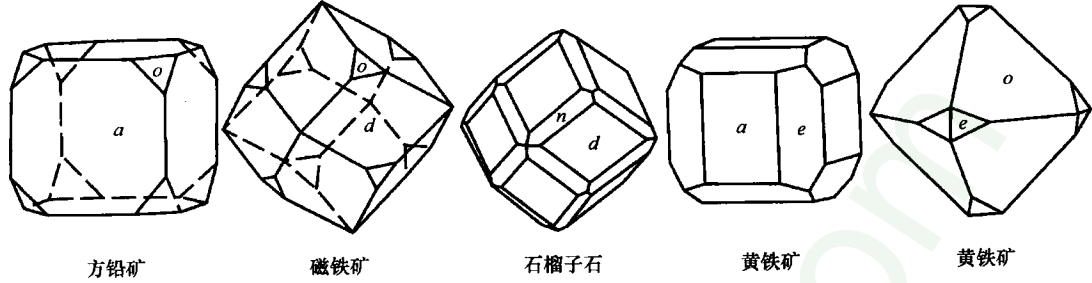


图 6-23 等轴晶系六八面体晶类方铅矿、磁铁矿、石榴子石和偏方复十二面体晶类黄铁矿的聚形晶  
(据潘兆橐等, 1993)

$a$ —立方体;  $o$ —八面体;  $d$ —菱形十二面体;  $n$ —四角三八面体;  $e$ —五角十二面体

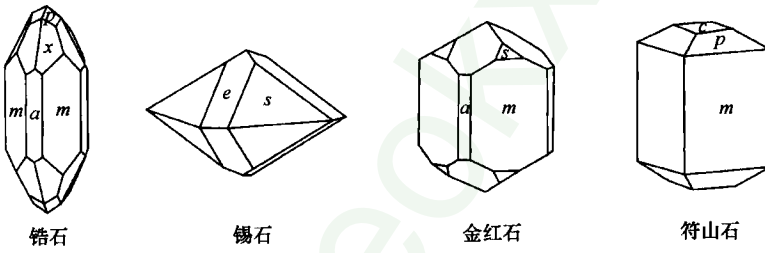


图 6-24 四方晶系复四方双锥晶类锆石、锡石、金红石、符山石聚形晶  
 $c$ —平行双面 $\{001\}$ ;  $a$ —四方柱 $\{100\}$ ;  $m$ —四方柱 $\{110\}$ ;  $s$ —四方双锥 $\{111\}$ ;  
 $p$ —四方双锥 $\{111\}$ ;  $e$ —四方双锥 $\{101\}$ ;  $x$ —复四方双锥 $\{311\}$

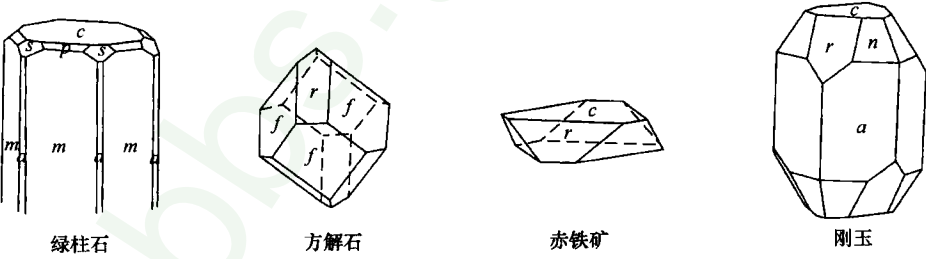


图 6-25 六方晶系复六方双锥晶类绿柱石和三方晶系复三方偏三角面体晶类方解石、赤铁矿和刚玉的聚形晶

$c$ —平行双面 $\{0001\}$ ;  $r$ 和 $f$ —菱面体 $\{10\bar{1}0\}$   $\{02\bar{2}0\}$ ;  $s, n$ 和 $p$ —六方双锥 $\{11\bar{2}1\}$   $\{22\bar{4}3\}$   $\{10\bar{1}1\}$ ;  
 $m$ 和 $a$ —六方柱 $\{10\bar{1}1\}$   $\{11\bar{2}0\}$

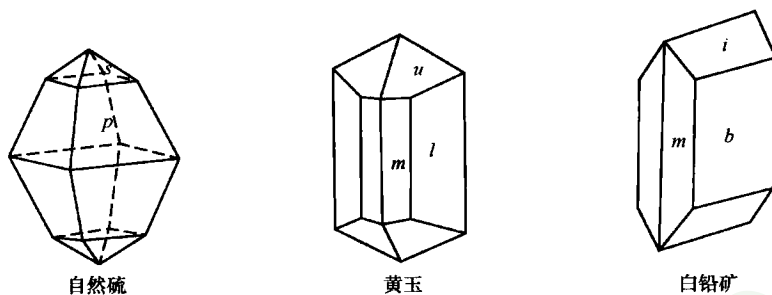


图 6-26 斜方晶系斜方双锥晶类自然硫、黄玉、白铅矿的聚形晶

$s$ —斜方双锥 $\{111\}$ ;  $p$ —斜方双锥 $\{113\}$ ;  $u$ —斜方双锥 $\{111\}$ ;  $m$ —斜方柱 $\{110\}$ ;  $l$ —斜方柱 $\{120\}$ ;  $i$ —斜方柱 $\{021\}$ ;  $b$ — $\{010\}$

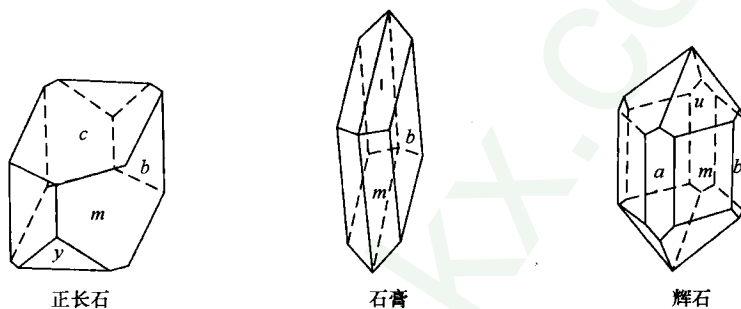


图 6-27 单斜晶系斜方柱晶类正长石、石膏、辉石的聚形晶

$a$ —平行双面 $\{100\}$ ;  $b$ —平行双面 $\{010\}$ ;  $c$ —平行双面 $\{001\}$ ;  $y$ —平行双面 $\{201\}$ ;  $m$ —斜方柱 $\{110\}$ ;  $l$ —斜方柱 $\{111\}$ ;  $n$ —斜方柱 $\{111\}$ ;  $o$ —斜方柱 $\{221\}$

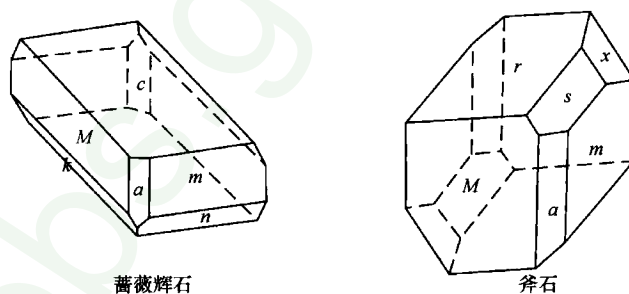


图 6-28 三斜晶系平行双面晶类蔷薇辉石、斧石的聚形晶

$a$ —平行双面 $\{100\}$ ;  $c$ —平行双面 $\{001\}$ ;  $m$ —平行双面 $\{110\}$ ;  $M$ —平行双面 $\{1\bar{1}0\}$ ;  $k$ —平行双面 $\{221\}$ ;  $n$ —平行双面 $\{2\bar{2}1\}$ ;  $s$ —平行双面 $\{201\}$ ;  $x$ —平行双面 $\{111\}$ ;  $r$ —平行双面 $\{1\bar{1}1\}$

## 思考题与习题

1) 是否可以说立方体单形可以分成 3 对平行双面, 为什么?

2) 晶面与任何一个对称型的位置关系最多只能有 7 种, 所以一个晶体上最多只能有 7 个单形相聚构成聚形?

3) 根据单形的几何形态得出: 立方体的对称型为  $m\bar{3}m$ , 五角十二面体的对称型为  $m\bar{3}$ , 它们的对称型不同, 所以不能相聚, 对吗? 为什么?

4) 为什么在三方晶系(除 3 外)和六方晶系(除  $\bar{6}$  外)对称型都出现六方柱这一单形? 这些六方柱对称性一样吗? 为什么?

5) 在同一晶体中能否出现两个相同形号的单形?

6) 菱面体与六方柱能否相聚? 相聚之后其对称型属于 3,  $\bar{3}m$  还是  $6/mmm$ ? 为什么?

7) 在聚形中如何区分下列单形: 斜方柱与四方柱; 斜方双锥、四方双锥与八面体; 三方单锥与四面体; 三方双锥与菱面体; 菱形十二面体与五角十二面体。

8) 在等轴晶系中下列单形符号代表哪些常见单形:  $\{100\}$ ,  $\{110\}$ ,  $\{111\}$ 。

9) 等轴晶系、四方晶系和低级晶族中的晶面(111)都与 3 个晶轴正端等交吗?  $\{111\}$  在这 3 个对称型中各代表什么单形?

10) 写出各晶系常见单形及单形符号, 并总结归纳以下单形符号在各晶系中各代表什么单形:  $\{100\}$ ,  $\{110\}$ ,  $\{111\}$ ,  $\{10\bar{1}1\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$ ,  $\{11\bar{2}0\}$ ,  $\{11\bar{2}1\}$ 。

11) 在极射赤平投影图中找出  $2/m$ 、 $mmm$ 、 $4/mmm$ 、 $m\bar{3}$ 、 $m\bar{3}m$  对称型中的最小重复单位, 并设置 7 个原始位置推导单形。

12) 柱类单形是否都与 Z 轴平行?

13) 为什么在实际晶体上, 同一单形的各个晶面性质相同? 在理想发育的晶体上同一单形的各个晶面是否同形等大?

14) 五角十二面体和菱形十二面体与 3 根彼此垂直的  $L^4$  (或  $L^2$ ) 的空间交截关系有何异同?

15) 四角三八面体与三根彼此垂直的  $L^4$  (或  $L^2$ ) 相交的特点?

16) 在 47 种几何单形中, 下列单形能否相聚? 为什么?

八面体与四方柱、六方柱与菱面体、五角十二面体与平行双面、三方双锥与六方柱、斜方柱与四方柱、三方单锥与单面。

# 第七章 晶体的规则连生

## 本章概要

- 1) 平行连生概念。
- 2) 双晶概念与双晶要素;双晶类型;若干常见矿物晶体的双晶律。
- 3) 浮生与交生概念。

上一章讨论的单形和聚形都是针对单个晶体的理想形态展开的。天然生成或人工合成的晶体既以与其他晶体在结构上不相关联的独立单体产出,也常以结构上彼此连通或密切相关的多个晶体的连生体产出。按照相互连生的个体间对称要素或结构关联特点,可将连生体的形态进一步分为规则连生和不规则连生。晶体的不规则连生将在下文的矿物形态部分加以讨论,本章仅介绍同种晶体间的平行连生和双晶及异种或同种晶体间的浮生和交生几种规则连生现象。

## 第一节 平行连生

平行连生(parallel grouping)是指结晶取向完全一致的两个或两个以上的同种晶体连生在一起。具平行连生关系的晶体称平行连晶。平行连晶外形上表现为各晶体的所有几何要素相互平行,其连生部位出现凹入角但内部结构呈连续贯通的格子构造。因此,从结构特点上来看,平行连晶与单晶体没有什么区别。

图 7-1 展示了自然铜、明矾石和石英平行连生构成的奇妙景观。

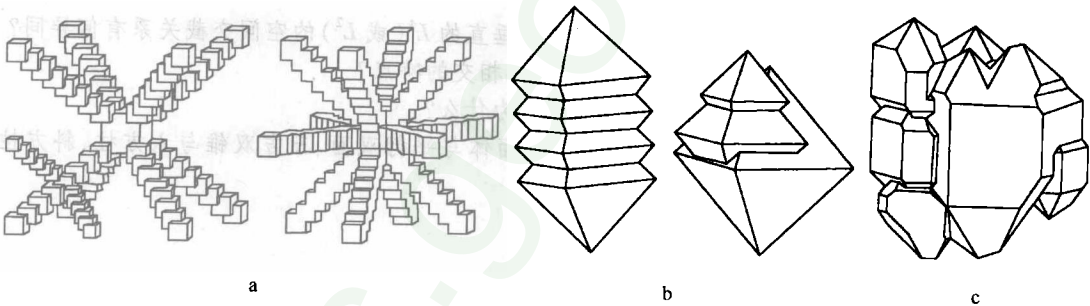


图 7-1 平行连晶  
(据罗谷风,1984)

a—自然铜,由立方体单晶平行连生构成的树枝晶;b—明矾石,八面体单晶构成的宝塔状平行连晶;c—石英

平行连晶的成因可以理解为结晶取向完全一致且相邻近的同种晶核或雏晶,在进一步长大的过程中其晶体边缘逐渐外延、靠拢并拼接在一起。已有的晶体上若形成结晶学取向完全相同的晶核并逐步长大也能构成平行连晶。在自然结晶条件下,结晶能力强或结晶速度快的晶体容易形成平行连生体。生产工艺过程中形成的人造矿物也常见平行连生现象。

## 第二节 双 晶

### 1. 双晶的概念

双晶(twin, twinned crystal)又称孪晶,是指两个或两个以上的同种晶体,其结晶学取向彼此

呈现为一定对称关系的规则连生体。连生在一起呈双晶位的各单晶体之间,凭借某种几何要素(点、线、面等)实施对称操作(反伸、旋转、反映),可以达到彼此重合、平行或构成一个完整单晶体。在双晶的接合部位,多数都具有凹入角,而有的外形酷似单体,并不存在凹入角,但体现其内部结构特点的格子构造并非平行连续,呈共格过渡或相似面网衔接关系。

## 2. 双晶要素

双晶要素(twin element)是假想的点、线、面等几何要素,凭借其进行反伸、旋转、反映等对称操作后,可使双晶的一个单体的方位发生变换而与另一个单体实现重合、平行或拼接成一个完整的晶体。双晶要素包括双晶面、双晶轴和双晶中心。其中,双晶面和双晶轴在描述双晶特征中具有重要意义。

双晶面(twinning plane) 是一个假想的平面,通过该面的镜像反映可以使呈双晶位的两个单体实现重合、平行或拼合成一个完整晶体。从图 7-2 石膏的燕尾双晶可以看出,双晶面  $tp$  两侧的晶体呈镜像对称关系。在实际双晶中,双晶面常常平行于单晶体的某个晶面,或垂直于某晶带轴,所以双晶面的空间方位常借助与其平行的晶面符号来表达。如,石膏燕尾双晶的双晶面  $tp$  平行于单晶体的(100)晶面,可写作双晶面  $tp \parallel (100)$ 。

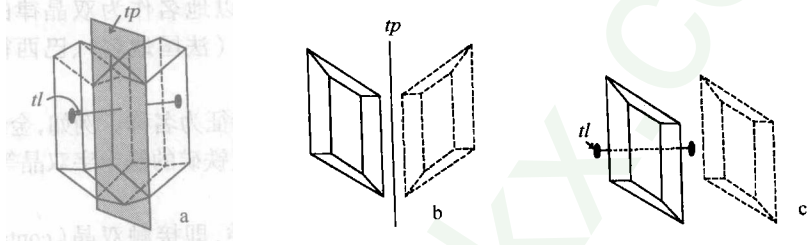


图 7-2 石膏的燕尾双晶(a)及其双晶面(b)和双晶轴(c)  
(据秦善,2004)

双晶轴(twinning-axis) 为一假想直线,双晶的其中一单体围绕该直线旋转  $180^\circ$  后,可与另一单体重合、平行或拼合成一个完整晶体。图 7-2 中的直线  $tl$  即是石膏燕尾双晶的双晶轴。双晶轴常常垂直于单晶体的某个晶面,或平行于其中一个单晶体的某些晶棱或晶带轴,所以双晶轴的空间方位也常借用其垂直的晶面或平行的晶带轴的符号来表示。如,石膏燕尾双晶的双晶轴  $tl$  垂直于单晶体的(100)晶面,可写作双晶轴  $tl \perp (100)$ 。

双晶中心(twinning-center) 为一假想的几何点,通过该点将双晶的其中一个晶体进行反伸操作后,两个单体实现相互重合、平行或拼合成一个完整晶体。

上述 3 个双晶要素颇类似于晶体的对称面、对称轴和对称中心等对称要素。所不同的是,凭借双晶要素进行旋转、反映、反伸等对称操作后,并非使单晶体的相同部分重复,而是使双晶的一个单体的方位发生变换而与另一个单体实现重合、平行或拼接成一个完整晶体。很显然,双晶面、双晶轴和双晶中心绝不可能平行任何单晶体中的对称面、对称轴和对称中心。

此外,与对称要素相似,双晶中可能存在的双晶面和双晶轴也不止一个,甚至已知一个双晶要素时借助单体中对称要素的操作还能找到其他性质相同的双晶要素。同时,与对称型国际符号省略等同或衍生的对称要素相似,一个双晶中单体间的取向关系只需描述其中一个双晶面或双晶轴就能确定,其他双晶要素往往省略。通常,人们使用双晶面和双晶轴来描述双晶特征,而很少使用双晶中心,所以双晶中心在双晶分析和描述中没有实际意义。

## 3. 双晶接合面

双晶接合面(composition surface,规则平面时可用 composition plane),即双晶单体间的实际接合界面。通常情况下,该接合界面可以是简单的平面或折面。但有时由于双晶单体的接合关

系复杂,其接合面可以很复杂。由于双晶的单体往往结晶取向不一致,所以其接合面处的晶格并非呈连续一贯的面网,即接合面两侧的晶格取向是不一致的。从晶体化学的角度看,这种结晶取向不一致又能接合在一起的晶体,其接合面的晶格面网应当是个共格面网(common net,该面网与两侧延伸的面网均有相似之处),只有这样它们才能“有机地”接合在一起。

呈规则平面的双晶接合面空间方位也常常借助单晶体中与之平行的晶面的晶面符号表达。例如,锡石膝状双晶的接合面 $//(101)$ ;正长石卡斯巴律双晶的接合面通常 $//(010)$ 。

需要指出的是,双晶接合面不是双晶要素,它是只表达双晶单体之间实际接合方式而不是表达单体之间取向关系的一种几何要素。由此可以看出,它与双晶要素共同表征双晶特征才能使双晶特征唯一化。所以,一般用双晶要素和双晶接合面组合的方式描述双晶特征。

#### 4. 双晶律

双晶律(twin law)即双晶中单体的连生规律。双晶律一般以双晶要素与双晶接合面组合的方式来表述,也可有如下的一些命名方式:

**以矿物命名** 如果某双晶律常出现在固定的矿物中,就以某特征矿物的名称命名该双晶律,例如钠长石律、尖晶石律、云母律、文石律等。

**以发现地命名** 有时为了纪念某双晶律的最初发现地,就以地名作为双晶律的名称。例如,正长石的卡斯巴律双晶(捷克斯洛伐克地名)、石英的道芬律(法国地名)、巴西律和日本律双晶等。

**以形态命名** 一些双晶体的形态特殊,为便于记忆就以形态特征为名称。例如,金红石族矿物的膝状双晶(或肘状双晶)、十字石的十字双晶、石膏的燕尾双晶、黄铁矿的铁十字双晶等。

#### 5. 双晶类型

按照双晶各单体间接合方式的不同,一般把双晶分成两大类,即接触双晶(contact twin)和贯穿双晶(penetrate twin, interpenetrate twin)。以下简述之。

##### (1) 接触双晶

接触双晶是各邻接单体以简单的平面相接触构成的双晶。接触双晶又可进一步划分出简单接触双晶、聚片双晶、环状双晶和复合双晶等类型。

**简单接触双晶(simple contact twin)** 由两个单体以一个平面接合在一起而成的双晶,如石膏的燕尾双晶(图7-2)。

**聚片双晶(polysynthetic twin)** 由多个单晶体以双晶接合面彼此平行的关系生长在一起构成的双晶。如,斜长石的聚片双晶是由多个板状斜长石晶体以一组平行 $(010)$ 的双晶接合面连生而成的双晶,其相间单晶片片的结晶学取向相同(图7-3)。

**环状双晶(cyclic twin)** 指两个以上的单体彼此以简单接触关系呈环状或轮辐状连生而成的双晶。环状双晶中相邻单体的接合面为平面,若干接合面呈等角度放射状排列。按组成双晶的单体个数,可将环状双晶进一步分为三连晶(trilling)、四连晶(fourling)、五连晶(fiveling)、六连晶(sixling)(图7-4)、八连晶(eightling)等。

**复合双晶(compound twin)** 是由两种以上的简单接触双晶关系组成的双晶复合体。例如,图7-5所示卡钠复合双晶中,单体1与2以及单体3与4彼此间按钠长石律接合,双晶轴 $\perp(010)$ ;单体2与3之间按卡斯巴律接合,双晶轴 $//Z$ 轴。在接触双晶当中,复合双晶是较为复杂的双晶类型,实际晶体中较为少见。

##### (2) 贯穿双晶

双晶的各单体彼此相互穿插,形成复杂的穿插接触关系,其接合面呈复杂折面。简单的穿插关系可以通过双晶接合面加以描述,但有时穿插关系太复杂只能描述其接合面的主要特征。如正长石的卡斯巴律双晶,其接合面可以描述为“以 $//(010)$ 为主的曲折接合面”。贯穿双晶可以呈现许多不同的形态(图7-6及图7-7)。

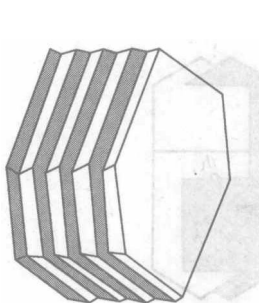


图 7-3 斜长石的聚片双晶

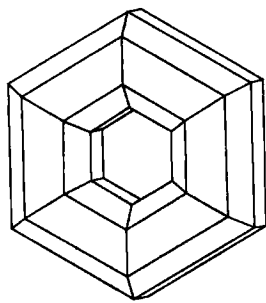


图 7-4 金红石的环状六连晶

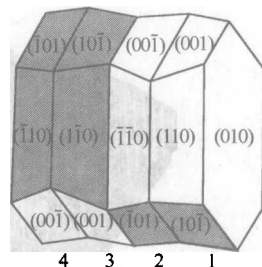


图 7-5 斜长石的卡钠复合双晶

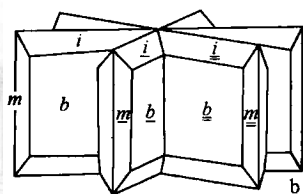
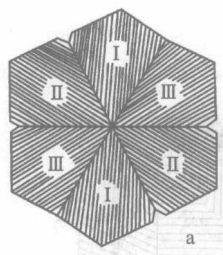


图 7-6 文石(a)与白铅矿(b)的贯穿三连晶  
(a 据 C. S. Hurlbut, JR., 1977; b 据罗谷风, 1984)

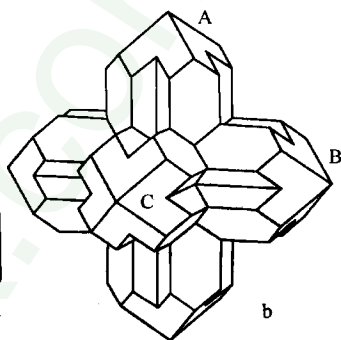
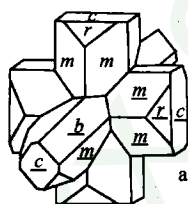


图 7-7 十字石(a)和钙十字沸石(b)按两种  
双晶律形成的贯穿双晶  
(a 据潘兆椿等, 1993; b 据秦善, 2004)

## 6. 双晶的识别

实际晶体中,一些双晶有明显的宏观特征,易于识别,而有些双晶则需借助晶面上的微形貌才能识别。下面是一些常用的双晶识别标志。

**凹入角** 由单形、聚形和本章上文的学习可知,单晶体均为凸多面体,平行连晶及双晶中单体的接合部位常常形成凹入角,所以同种晶体上出现凹角有可能构成双晶。但需要注意,凹角既不是识别双晶的必要条件,也不是识别双晶的充分条件,尚需结合下述标志进一步鉴别。

**双晶纹和双晶缝合线** 双晶表面常留有其接合面的线状痕迹,由于单体接合紧密呈细线状,所以称为双晶纹和双晶缝合线。双晶缝合线是一根孤立的线条,可以是直线,也可以是折线或曲线。双晶纹通常是一组平行线。例如,在斜长石聚片双晶 $\perp(010)$ 方向,可见一组平直细密的双晶纹(图 7-8a);在石英道芬双晶的柱面可见一条细的曲线状缝合线(图 7-8b);在正长石卡斯巴双晶的 $\perp(010)$ 方向可见一条折线状缝合线(图 7-8c)。缝合线有时不能被观察到,而要依据其他晶面微形貌的不连续性推断获得。如,具道芬双晶或巴西双晶的石英柱面上双晶缝合线两侧的晶面横纹不连续。

**蚀象** 蚀象也是识别双晶的标志之一。对于容易被风化刻蚀的晶体,其表面常常留有蚀象。由于双晶中单体的取向不一致,因而在相邻单体中的蚀象取向也不一致,据此能推定双晶的存在。例如,石英柱面上缝合线两侧的蚀坑呈现两次旋转对称关系(图 7-9)。此外,由于双晶接合面的格子构造不连续,容易出现结构“缺陷”,也是易被风化的薄弱部位,所以沿双晶缝合线有时出现线状排列的蚀象。

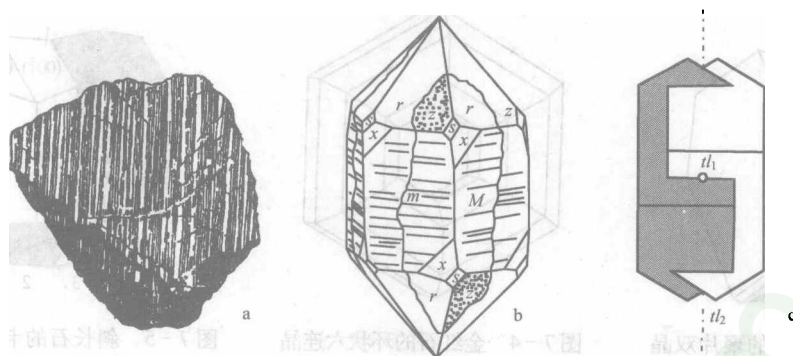


图 7-8 斜长石  $\perp$  (010) 方向的聚片双晶纹(a)、石英道芬双晶柱面的曲线状缝合线(b)和正长石卡斯巴双晶  $\perp$  (010) 方向的折线状缝合线(c)  
(a 据 Hurlbut, C. S., Jr., 1977; b 据潘兆橐等, 1993; c 据罗谷风, 1984)

双晶缝合线

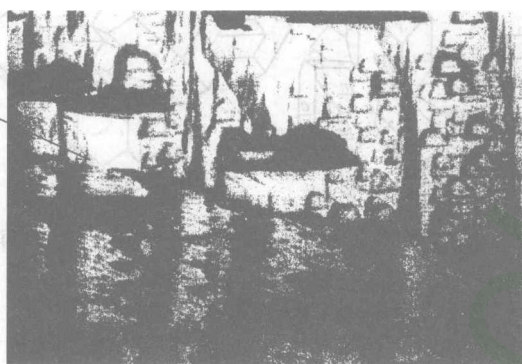


图 7-9 石英双晶缝合线两侧的蚀象  
(据赵珊茸等, 2004)

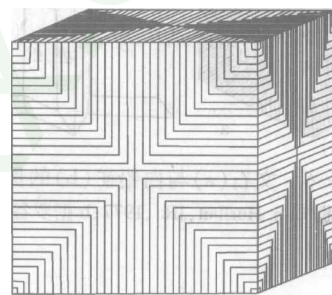


图 7-10 黄铁矿十字双晶的  $m3m$  假对称  
(据南京大学岩矿教研室, 1978)

**假对称** 任何晶体都有固定的对称性。如果某晶体的对称不符合其固有的对称特点, 则该晶体应由双晶组成。例如, 图 7-10 所示以 (110) 为双晶面的黄铁矿十字律贯穿双晶, 外形呈立方体, 晶面条纹也表现为  $m3m$  对称。但黄铁矿的固有对称性为  $m3$ , 该  $m3m$  对称显然为假对称。

## 7. 双晶的成因

一般认为, 双晶的成因主要有以下 3 种:

1) 在双晶位取向的晶核基础上生长。在晶体生长的早期成核过程中, 两个或若干个晶核的位置处在双晶中单体的结晶学方位上, 即呈“双晶位取向”。如果晶体继续长大, 并逐渐连生在一起, 最终就会发育成双晶。由这种方式形成的双晶称为生长双晶 (growth twin)。因为从呈“双晶位”的晶核生长到彼此即将连接时, 结晶就位的原子或离子等质点对于两个晶核上相似面网的就位几率相同, 因而在接合面处形成共格面网。按共格面网形成双晶时所需能量较小, 因而易于形成并稳定存在。生长双晶是最常见的一种双晶类型。

2) 同质多象转变。在同质多象转变过程中, 驱动发生转变的物理化学条件不均一或发生不同结构转变的趋势近乎均等, 因而可能导致晶体的一部分发生转变而另一部分不发生转变或晶体不同部位发生不同趋向的转变, 最终使得原晶体的两部分呈“双晶位”关系。由同质多象转变方式形成的双晶称为转变双晶 (transformation twin)。图 7-11 为  $\beta$ -石英转变为  $\alpha$ -石英 (即通

常所称石英)时形成道芬双晶的图示。

3) 机械外力的作用。晶体形成后,受机械外力的作用,晶格内的面网可能发生整体性滑移但不破裂,滑移的结果可能使晶体结构形成具“双晶位”特征的两部分,即构成双晶(图7-12)。这种双晶称为机械双晶(mechanical twin)或滑移双晶(gliding twin)或形变双晶(deformation twin)。例如,大理岩中的方解石晶体,常由于机械作用而形成以 $\{0112\}$ 为双晶面和接合面的负菱面聚片双晶。

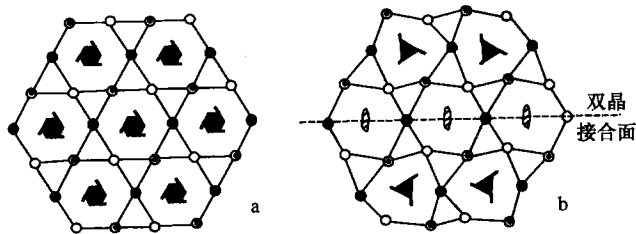


图7-11  $\beta$ -石英(a)转变为 $\alpha$ -石英的道芬双晶(b)  
前后 $\text{Si}^{4+}$ 在(0001)面的投影  
(据罗谷风,1984)

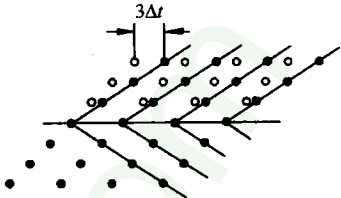


图7-12 在剪切力作用下晶格产生机械双晶时面网上结点的滑移变形  
(据赵珊茸等,2004)

上述3种双晶若以时间分类,则生长双晶因其形成与晶体的生长是同时的,故称为原生双晶(primary twin);机械双晶和转变双晶都晚于其原始晶体的形成,故都被称为次生双晶(secondary twin)。

8. 研究双晶的意义

在自然形成的矿物晶体中,约有1/5可出现双晶,其中一些非常重要的矿物晶体还总是出现特有的双晶类型,如斜长石的聚片双晶、正长石のカ斯巴双晶等,所以双晶是鉴定某些矿物、确定矿物空间取向的重要标志。

此外,机械双晶是地质构造变动的产物,据以可以确定构造运动的方向和强度,具有十分重要的地质意义。

在宝玉石和矿物晶体材料工业领域,有些矿物晶体的利用价值还与双晶密切相关,如双晶的出现会严重影响某些晶体的加工性能和光学效应,具双晶的水晶不能用作压电材料,具双晶的冰洲石不能用于制造光学材料等。

因此,双晶是结晶学、矿物学、地质学、宝石学和晶体材料科学学科中一个颇具实际意义的研究领域。

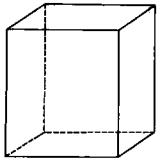
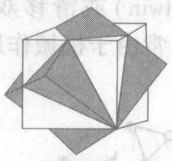
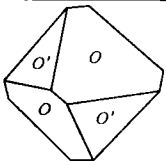
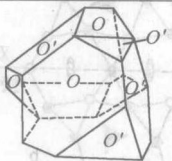
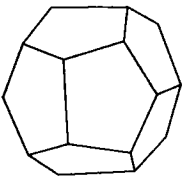
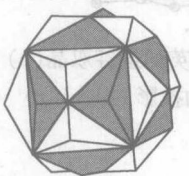
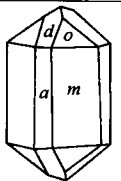
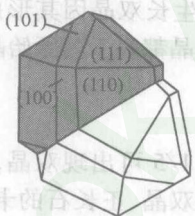
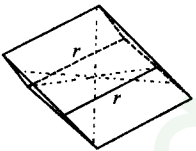
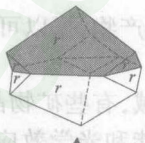
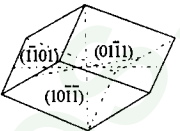
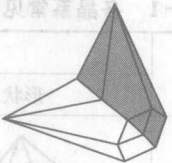
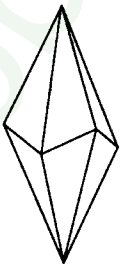
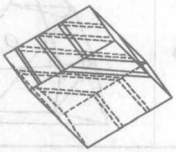
9. 各晶系常见矿物的双晶

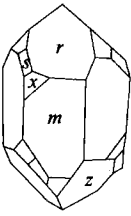
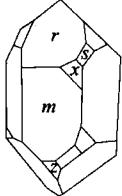
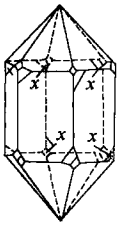
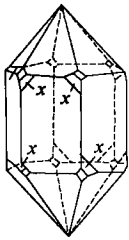
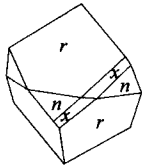
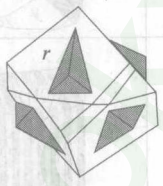
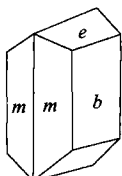
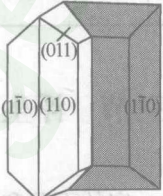
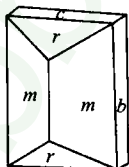
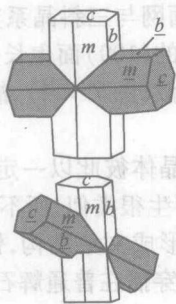
见表7-1。

表7-1 各晶系常见矿物的双晶

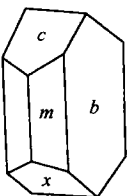
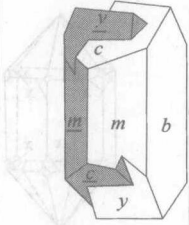
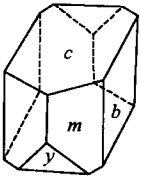
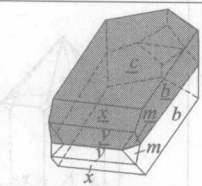
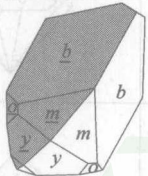
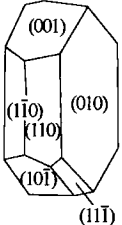
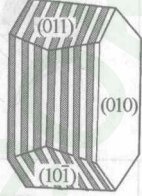
晶系	矿物名称、成分及对称型	单形的形状	双晶		
			形状	类型(别名)	双晶律
等轴晶系	尖晶石 $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ $3L^44L^36L^29PC$			接触双晶	双晶轴 $\perp(111)$ 双晶面 $\parallel(111)$ 接合面 $\parallel(111)$ (尖晶石双晶律)

续表

晶系	矿物名称、成分及对称型	单形的形状	双晶		
			形状	类型(别名)	双晶律
等轴晶系	萤石 $\text{CaF}_2$ $3L^4 4L^3 6L^2 9PC$			穿插双晶	双晶轴 $\perp (111)$ 双晶面 $\parallel (111)$
	闪锌矿 $\text{ZnS}$ $3L_1^4 4L^3 6P$			接触双晶	双晶轴 $\perp (111)$ 双晶面 $\parallel (111)$ 接合面 $\parallel (111)$
	黄铁矿 $\text{FeS}_2$ $3L^2 4L^3 3PC$			穿插双晶 (铁十字)	双晶轴 $\perp (110)$ 双晶面 $\parallel (110)$
四方晶系	锡石 $\text{SnO}_2$ $L^4 4L^2 5PC$	 $a \mid 100, m \mid 110$ $d \mid 101, o \mid 111$		接触双晶 (膝状双晶)	双晶轴 $\perp (011)$ 双晶面 $\parallel (011)$ 接合面 $\parallel (011)$
三方晶系	方解石 $\text{CaCO}_3$	 正形 $r \mid 10\bar{1}1$		接触双晶	双晶轴 $\perp (0001)$ 双晶面 $\parallel (0001)$ 接合面 $\parallel (0001)$
		 负形 $\{10\bar{1}1\}$		接触双晶	双晶面 $\parallel (10\bar{1}1)$ 接合面 $\parallel (10\bar{1}1)$
		 $v \mid 21\bar{3}1$		接触双晶	双晶面 $\parallel (01\bar{1}2)$ 接合面 $\parallel (01\bar{1}2)$

晶系	矿物名称、成分及对称型	单形的形状	双晶		
			形状	类型(别名)	双晶律
三方晶系	石英 $\text{SiO}_2$ $L^33L^2$	 左形 $x\{6\bar{1}51\}$  右形 $x\{51\bar{6}1\}$	 	穿插双晶 (道芬双晶) 穿插双晶 (巴西双晶)	双晶轴//Z轴 接合面不规则 二左形或二右形晶体 (道芬双晶律) 双晶轴//(11 $\bar{2}$ 0) 接合面//(11 $\bar{2}$ 0) 一左晶与一右晶 (巴西双晶律)
	辰砂 $\text{HgS}$ $L^33L^2$	 $r\{10\bar{1}1\}, n\{20\bar{2}1\}$ $x\{42\bar{6}3\}$		穿插双晶	双晶轴//z轴
斜方晶系	文石 $\text{CaCO}_3$ $3L^23PC$	 $m\{110\}, b\{010\}$ $e\{011\}$		接触双晶	双晶面//(110) 接合面//(110)
	十字石 $\text{FeAl}[\text{SiO}_4]_2\text{O}_2(\text{OH})_2$ $3L^23PC$	 $b\{010\}, c\{001\}$ $m\{110\}, r\{101\}$		穿插双晶 穿插双晶	双晶面//(031) 双晶面//(231)

续表

晶系	矿物名称、成分及对称型	单形的形状	双晶		
			形状	类型(别名)	双晶律
单斜晶系	正长石 $K[AlSi_3O_8]$ $L^2PC$			穿插双晶 (卡斯巴双晶)	双晶轴//Z轴 接合面以(010)为主 (卡斯巴双晶律)
				接触双晶 (曼尼巴双晶)	双晶轴 $\perp$ (001) 接合面//(001) (曼尼巴双晶律)
		$b 010 , c 001 $ $m 110 , x 10\bar{1} $ $y 20\bar{1} $		接触双晶 (巴温诺双晶)	双晶轴 $\perp$ (021) 接合面//(021) (巴温诺双晶律)
三斜晶系	钠长石 $Na[AlSi_3O_8]$ C			接触双晶 (钠长石双晶)	双晶面//(010) 接合面//(010) (钠长石双晶律)

### 第三节 浮生与交生

#### 1. 浮生

浮生 (overgrowth) 是指一种晶体以一定的面网和确定的取向关系附着生长于另一种晶体表面, 或者同种晶体以不同单形相似面网的晶面附生在在一起的规则连生。

例如: 斜方晶系十字石的(010)面网与三斜晶系蓝晶石的(100)面网的结构和成分均相似, 故十字石晶体的(010)面常依蓝晶石的(100)面生长(图7-13); 三方晶系赤铁矿的(0001)面网与四方晶系金红石(100)面网结构相似(图7-14), 故它们常以这两种面网浮生。

#### 2. 交生

交生 (intergrowth) 指两种不同的晶体彼此以一定的取向关系交互结晶生长, 形成交叉连生体的现象。交生晶体的接合部位与浮生很类似, 所不同的是呈交生关系的两种晶体互呈交嵌关系。例如: 石英嵌生于粗粒钾长石中形成文象结构, 钾钠长石固溶体降温时钠长石析出形成条纹长石(图7-15)以及长柱状角闪石穿插在普通辉石中以(100)和 $(\bar{1}00)$ 面接触(图7-16)等均是交生的实例。

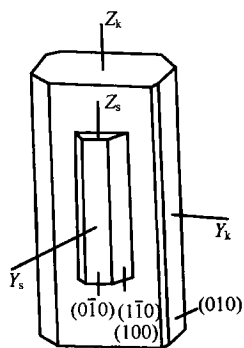


图 7-13 十字石以(010)面  
浮生于蓝晶石(100)面上  
(据潘兆椿等,1993)

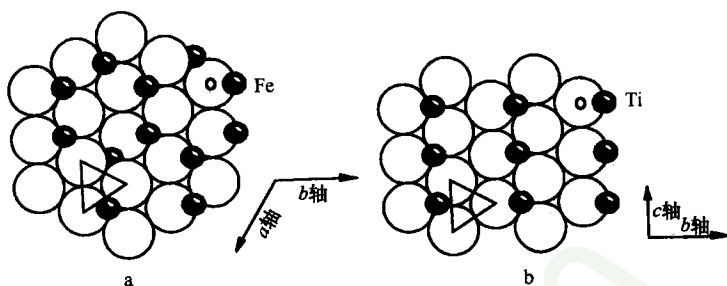


图 7-14 赤铁矿(0001)面网(a)与金红石(100)面网(b)的结构  
(据罗谷风,1984)

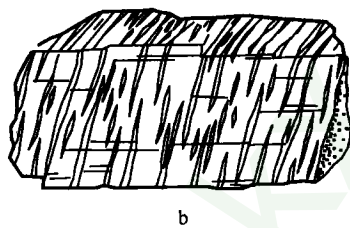
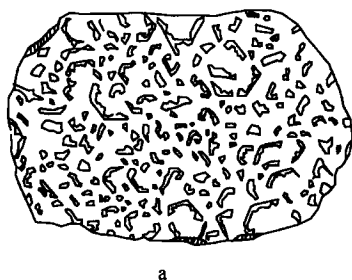


图 7-15 石英嵌生于钾长石中的文象结构(a)和  
钠长石嵌生于钾长石中的条纹长石(b)  
(据罗谷风,1984)

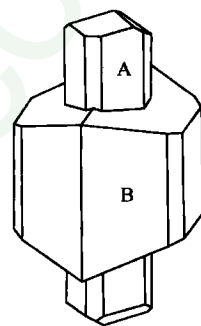


图 7-16 角闪石与普通  
辉石的交生  
(据秦善,2004)

## 思考题及习题

- 1) 何为双晶？研究双晶的意义何在？
- 2) 双晶面、双晶轴、双晶接合面的涵义？其空间方位如何表示？
- 3) 双晶面为什么不能平行晶体的对称面？
- 4) 双晶轴为什么不能平行晶体的偶次对称轴？
- 5) 双晶中心为什么不可能与单晶体的对称中心并存？
- 6) 斜长石(C)可以有卡斯巴律双晶和钠长石律双晶,为什么正长石( $L^2PC$ )只有卡斯巴律双晶,而没有钠长石律双晶？
- 7) 斜长石的卡-钠复合双晶中存在3种双晶律:钠长石律(双晶轴 $\perp(010)$ )、卡斯巴律(双晶轴 $\parallel c$ 轴)及卡-钠复合律(双晶轴位于(010)面内但 $\perp c$ 轴)。请问这三种双晶律的双晶要素共存符合于什么对称要素组合定理？
- 8) 不同晶体之间形成规则连生(浮生或交生)的内部结构因素是什么？双晶与平行连生在晶体结构上的本质区别何在？

# 第八章 晶体结构

## 本章概要

- 1) 空间格子的划分原则;各晶系空间格子的特征(晶胞参数);4种基本格子类型和14种布拉维格子。
- 2) 晶体结构对称与外部对称的联系与区别;晶体结构特有的对称要素和对称操作。
- 3) 空间群与等效点系概念;空间群国际符号的书写规律。
- 4) 晶体结构类型与典型结构分析。
- 5) 晶体中的缺陷类型。

## 第一节 14种布拉维空间格子

### 1. 空间格子的划分

#### (1) 划分原则

晶体结构的最基本特性是其内部质点在三维空间作有规律的周期性重复。表示晶体结构重复规律性的几何图形称为空间格子(点阵)。在实际晶体中,晶体结构是由晶体内部的相当点(原子种类相同,原子周围的环境和方位都相同的点)所构成的空间格子在三维空间排列而成。平行六面体是空间格子中的最小重复单位,整个晶体结构可视为是这种平行六面体在三维空间平行的、毫无间隙的重复堆砌而成的。

对于特定的晶体结构而言,其内部结点的分布是客观存在的,但平行六面体的选择是人为的,同一种格子构造,其平行六面体的选择可有多种方式。因此,在格子点阵中选择平行六面体需遵循以下原则:

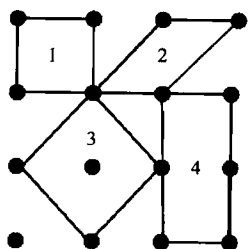


图 8-1 在格子点阵中选择平行六面体图解

1) 所选取的平行六面体应能反映结点分布整体所固有的对称性;

2) 在上述前提下,所选取的平行六面体中棱与棱之间的直角关系力求最多;

3) 在满足以上两条件的基础上,所选取的平行六面体的体积力求最小。

上述条件实质上与前面所讲的晶体定向的原则,即尽量使  $a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$  是一致的。

根据以上原则,分析图 8-1 所示的情况,显然按第 1 种方法来选取平行六面体才符合上述原则。在实际晶体结构中,这种被选取的基本重复单位(平行六面体)称为晶胞。

#### (2) 各晶系空间格子的形状和大小

平行六面体的形状和大小用它的 3 根棱长(轴长) $a, b, c$  及棱间的夹角(轴角) $\alpha, \beta, \gamma$  表征(图 8-2)。这组参数( $a, b, c; \alpha, \beta, \gamma$ )即为晶胞参数。各晶系的对称性不同,因而平行六面体形状也不同(图 8-3)、相应的晶胞参数特点各异。7 个晶系的晶胞参数特点如下:

等轴晶系:  $a=b=c; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

四方晶系:  $a=b \neq c; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

六方晶系及三方晶系:  $a=b \neq c; \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$

三方晶系:  $a=b \neq c; \alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ, 60^\circ, 109^\circ 28' 16''$

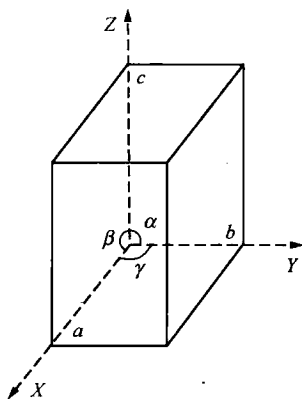


图 8-2 空间格子中平行六面体的表征

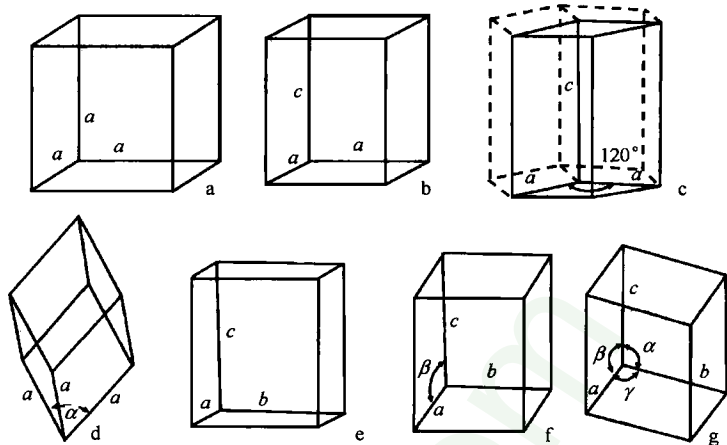


图 8-3 各晶系平行六面体的形状

a—等轴晶系；b—四方晶系；c—六方晶系；d—三方晶系；e—斜方晶系；  
f—单斜晶系；g—三斜晶系

斜方晶系： $a \neq b \neq c$ ； $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

单斜晶系： $a \neq b \neq c$ ； $\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$

三斜晶系： $a \neq b \neq c$ ； $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

## 2. 14 种布拉维空间格子

### (1) 4 种基本格子类型

由平行六面体选择原则选出的平行六面体中，结点（相当点）的分布只能有 4 种可能的情况，与其对应可分为 4 种格子类型（图 8-4）：

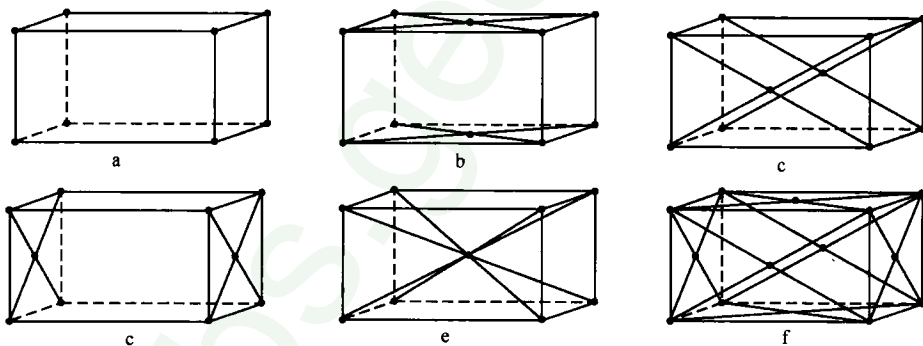


图 8-4 空间格子的 4 种基本类型

a—原始格子；b、c、d—均为底心格子；e—体心格子；f—面心格子

原始格子(P) 结点分布于平行六面体的 8 个角顶上。

底心格子 结点分布于平行六面体的角顶及某一对面的中心。其中，根据面中心点的位置特点又可细分为：①C 心格子(C)：结点分布于平行六面体的角顶和平行(001)一对面的中心；②A 心格子(A)：结点分布于平行六面体的角顶和平行(100)一对面的中心；③B 心格子(B)：结点分布于平行六面体的角顶和平行(010)一对面的中心。一般情况下称谓的底心格子指的是 C 心格子。对 A 心或 B 心格子，能转换成 C 心格子时，应尽可能地转换。当然，有时因特殊需要，也

可以选用 *A* 心、*B* 心格子而无需转换。

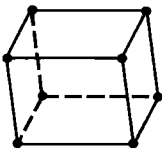
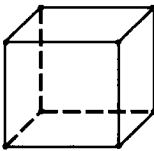
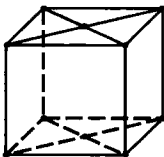
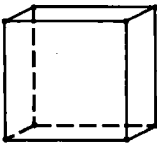
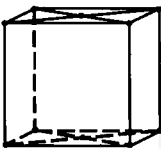
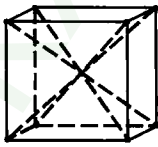
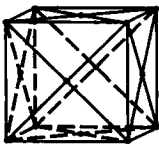
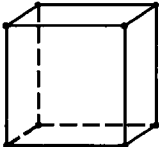
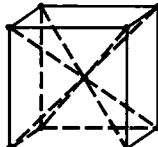
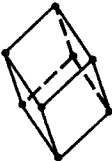

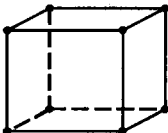
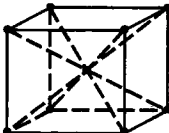
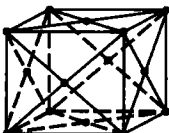
体心格子(*I*) 结点分布于平行六面体的角顶和体中心。

面心格子(*F*) 结点分布于平行六面体的角顶和三对面的中心。

(2)14 种布拉维空间格子

综合考虑平行六面体的形状及结点的分布情况,在晶体结构中只可能出现 14 种不同形式的空间格子。这是由布拉维(A. Bravais)于 1848 年最先推导出来的,故称为 14 种布拉维格子(表 8-1)。

表 8-1 14 种布拉维格子

	原始格子( <i>P</i> )	底心格子( <i>C</i> )	体心格子( <i>I</i> )	面心格子( <i>F</i> )
三斜晶系		<i>C</i> = <i>P</i>	<i>I</i> = <i>P</i>	<i>F</i> = <i>P</i>
单斜晶系			<i>I</i> = <i>C</i>	<i>F</i> = <i>C</i>
斜方晶系				
四方晶系		<i>C</i> = <i>P</i>		<i>F</i> = <i>I</i>
三方晶系		与本晶系对称不符	<i>I</i> = <i>R</i>	<i>F</i> = <i>R</i>
六方晶系		不符合六方对称	与空间格子的条件不符	与空间格子的条件不符
等轴晶系		与本晶系对称不符		

既然平行六面体有前述的 7 种形状和 4 种结点分布类型,空间格子为什么不是  $7 \times 4 = 28$  种而只有 14 种呢? 这是因为某些类型的格子彼此重复并可转换,还有一些不符合某晶系的对称特点而不能在该晶系中存在。现举几例略加说明。

如图 8-5、图 8-6、图 8-7、图 8-8 所示:三斜面心格子可转变成体积更小的三斜原始格子(图 8-5);单斜  $B$  心格子可转变成体积更小的单斜  $C$  心格子(图 8-6);四方底心格子可转变为体积更小的四方原始格子(图 8-7),三方菱面体体心格子可转变成体积更小的三方菱面体原始格子(图 8-8)。

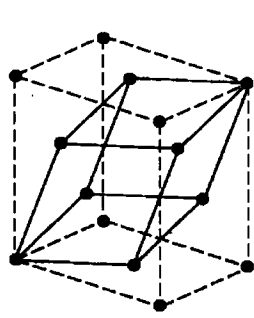


图 8-5 三斜面心格子转变成三斜原始格子

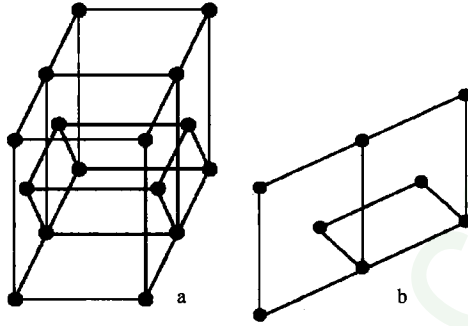


图 8-6 单斜  $B$  心格子转变成体积更小的单斜  $C$  心格子

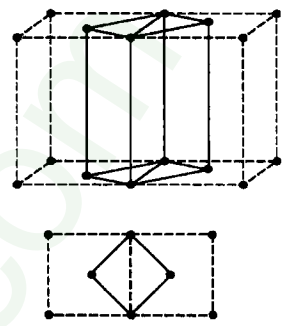


图 8-7 四方底心格子转变为四方原始格子

在等轴晶系中,若在立方格子中的一对面的中心安置结点,则完全不符合等轴晶系具  $4L^3$  的对称特点,因此不可能存在立方底心格子。

以上表明:当去掉一些重复的、不可能存在的空间格子后,在晶体结构中只可能出现 14 种空间格子即 14 种布拉维格子。

值得注意的是:六方原始格子可转换为具有双重体心的菱面体格子(图 8-9)。它的体积相当于六方原始格子的 3 倍,即与包括 3 个六方原始格子的六方柱状的底心格子的体积相当。同样,三方菱面体格子也可转换为具有双重体心的六方格子(图 8-10),它的体积相当于菱面体格

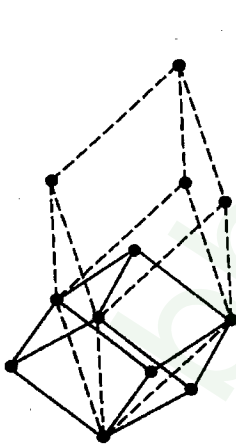


图 8-8 三方菱面体体心格子转变成三方菱面体原始格子

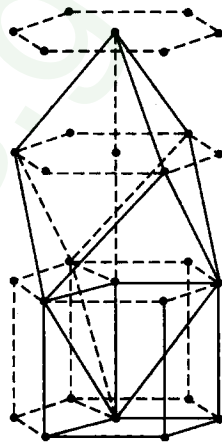


图 8-9 六方原始格子转换为具双重体心的菱面体格子

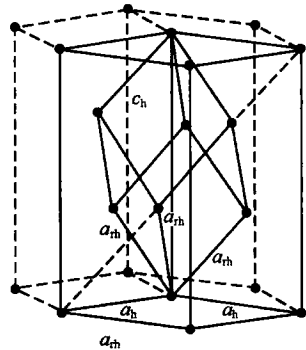


图 8-10 三方菱面体格子转换为具双重体心的六方格子

子的3倍。虽然上述所转换后的格子都不完全符合平行六面体的选择原则,但为了适应晶体的布拉维定向(即选取四个晶轴),三方菱面体格子常按六方格子进行转换;此时,晶胞的轴长前者以 $a_h$ 表示,后者以 $a_h$ 和 $c_h$ 表示。

### 3. 空间格子中点的坐标和行列、面网的符号

为了更好地描述空间格子中的结点、行列和面网,需要通过一定的方法以一定的符号形式把它们的位置或方位表示出来。这与前面讲过的晶面、晶棱(晶带、晶带轴)符号的表示方法相同但又有区别。

在空间格子中根据各晶系的特点建立起坐标系,通常把坐标原点置于平行六面体左侧后下方角顶处,以交于此角顶的三条棱分别作 $X, Y, Z$ 轴,以 $a, b, c$ 为坐标上的度量单位,其定向应符合右手系统(见图8-2)。

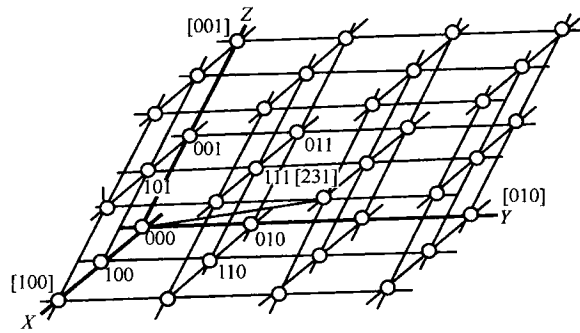


图8-11 行列符号表示图解

坐标也称为原子坐标。

#### (2) 行列符号

行列符号在表示方法及形式上与晶棱的符号完全相同,即 $[uvw]$ 。如一行列通过坐标原点,选一距原点距离最近的结点其坐标为 $u, v, w$ ,则此行列的符号为 $[uvw]$ (图8-11)。行列符号表示了一组互相平行取向相同的行列。

此外,还可将在结晶学中为等效的(即可通过晶体结构中的对称要素联系起来的)一组行列(选取其中一行列 $[uvw]$ )用符号 $(uvw)$ 表示之。如等轴晶系中的 $[100], [\bar{1}00], [010], [0\bar{1}0], [001], [00\bar{1}]$ 等行列可用符号 $[100]$ 表示之;同理,等轴晶系中的 $[111], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}11], [1\bar{1}\bar{1}], [111], [\bar{1}\bar{1}1], [\bar{1}1\bar{1}], [11\bar{1}]$ 可以 $(111)$ 表示。

#### (3) 面网符号

与晶面符号的表示方法及形式基本相同。但晶面符号仅表示晶体外形上某一晶面的空间方位,而面网符号则表示一组互相平行且面网间距相等的面网。面网符号采用米氏符号,写成

#### (1) 点的坐标

点的坐标的表示方法与空间解析几何中确定空间某点的坐标位置的标记方法相同。表达形式为 $u, v, w$ ,如图8-11。点的坐标 $u, v, w$ 中3个数值可以是正数、负数、分数或小数,如 $1, 1, 1; -1, 1, -1; 1/2, 1/2, 1/2; 0.2, 0.5, 0.5$ 等形式。当在一个单位晶胞中确定具体质点的坐标时,往往采用分数坐标。分数坐标是将轴单位的长度当作一个单位时的坐标。如在体心格子中,位于体心的结点其坐标为: $1/2, 1/2, 1/2$ 。这种

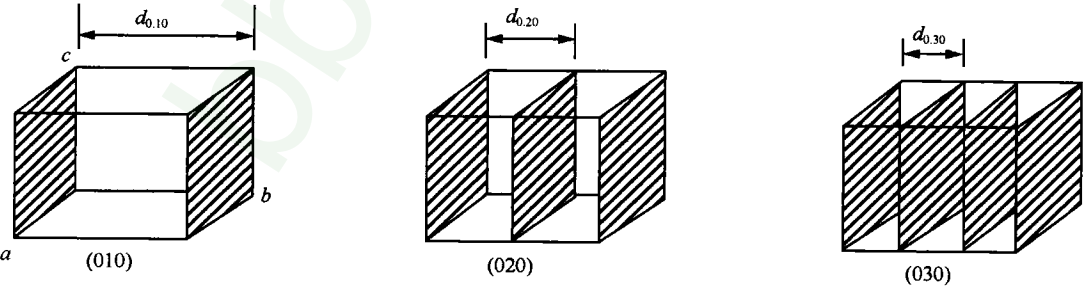


图8-12 面网符号表示图解

( $hkl$ )形式,括弧中 $h, k, l$ 为米氏指数。米氏指数是面网在晶轴上的分数截距的倒数。

一组互相平行的面网( $hkl$ )中,其相邻的面网间距用 $d_{hkl}$ 表示。 $h, k, l$ 绝对值越小, $d_{hkl}$ 值越大,网面密度亦越大。反之,其面网间距 $d_{hkl}$ 及网面密度越小。

在晶面符号( $hkl$ )中, $h, k, l$ 之间一般无公约数。特别是其中两个指数为零时,总可将其表示为(100)、(010)或(001)。而在表示面网时,( $hkl$ )中可以出现公约数,即可为( $nh \ nk \ nl$ )且还存在下列关系: $a_{nhknl} = 1/n \cdot d_{hkl}$ 。如图8-12中: $d_{020} = 1/2 \cdot d_{010}$ ;  $d_{030} = 1/3 \cdot d_{010}$ 。

## 第二节 晶体结构的对称性

前面几个章节讨论的是反映晶体外部宏观的对称及其规律性,而晶体的宏观对称是由其内部结构上的对称性所决定的,两者有着密切的联系。由于晶体的外形是有限图形,它的宏观对称是有限图形的对称,而晶体内部质点的周期性平移重复从微观角度来看是无限的,故晶体内部结构的对称属于微观无限图形的对称,晶体外部对称与结构对称之间既有联系又有区别。

### 1. 晶体的内部对称要素

由于晶体的内部对称具有微观无限图形的对称特点,因此,在晶体结构中平行于任何一个对称要素都有无穷多的和它相同的对称要素。同时,在晶体结构中还出现了一种在晶体外形上不可能有的对称操作——平移操作,从而使晶体内部结构除具有外形上可能出现的那些对称要素之外,还出现了一些特有的对称要素。晶体内部特有的对称要素和对称操作如下。

#### (1) 平移轴与平移操作

平移轴(translation axis)为晶体结构中假想的一条直线,相应的对称操作为沿此直线的平移。晶体结构沿着空间格子中的任意一条行列移动一个或若干个结点间距,均可使每一质点与其相同的质点重合。因此,空间格子中的任一行列都是代表平移对称的平移轴(在此意义上,平移轴又可视作实线),空间格子即为晶体内部结构在三维空间呈平移对称规律的几何图形。很明显,晶体结构中的平移轴从微观角度看其数量是无限的。

#### (2) 螺旋轴与旋转加平移操作

螺旋轴(screw axis)是晶体结构中一条假想直线和与直线平行的方向,相应的对称操作为围绕此直线的旋转和沿直线方向的平移。晶体结构围绕螺旋轴旋转一定角度,并沿轴的方向平移一定距离后,结构中的每一质点都与其相同的质点重合,整个结构自相重合。

按照对称定律,螺旋轴的轴次 $n$ 与对称轴一样,也只能为1,2,3,4,6;相应的最小基转角 $\alpha = 360^\circ/n$ , $180^\circ, 120^\circ, 90^\circ, 60^\circ$ 。螺旋轴的国际符号一般写成 $n_s$ 。 $n$ 为轴次, $s$ 为小于 $n$ 的自然数。若沿螺旋轴方向的结点间距标记为 $T$ ,则质点平移的距离 $t$ 应为 $(s/n)T$ 。如 $2_1, 2$ 为轴次(2次螺旋轴),最小基转角 $\alpha = 180^\circ$ ,平移距离 $t = (1/2)T$ 。

根据 $n$ 与 $s$ 的关系,螺旋轴可分为 $2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$ 共11种。对于一次轴,由于不存在小于 $n$ 的 $s$ 值,它实际上就是一次对称轴。而对称轴也可视为移距为零的同轴次的“螺旋轴”。

根据旋转的方向,可将螺旋轴分为左旋螺旋轴(顺时针旋转)和右旋螺旋轴(逆时针旋转)及中性螺旋轴(顺、逆时针旋转均可)。一般规定:对螺旋轴 $n_s$ 而言:凡 $0 < s < n/2$ 者,为右旋螺旋轴(包括 $3_1, 4_1, 6_1, 6_2$ );凡 $n/2 < s < n$ 者,为左旋螺旋轴(包括 $3_2, 4_3, 6_4, 6_5$ );而 $s = n/2$ 者,为中性螺旋轴(包括 $2_1, 4_2, 6_3$ )。

对于上述11种螺旋轴,其旋转方向和平移距离 $(s/n)T$ 都是以右旋方式为标准给出的。若以左旋方式为标准,沿顺时针方向转动 $\alpha$ 后,其平移距离 $t$ 应为 $(1 - s/n)T$ 。如对于左旋螺旋轴 $3_2$ ,以右旋为标准,逆时针转动 $120^\circ$ ,沿轴方向平移 $(2/3)T$ ,可与相同的图形重合,故记为 $3_2$ 。若顺时针旋转(左旋) $120^\circ$ ,沿轴方向只需平移 $(1 - 2/3)T = (1/3)T$ 就可与相同图形重合(图8-13)。

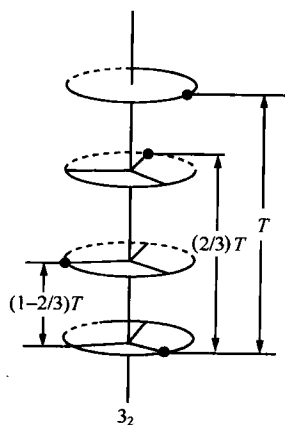


图 8-13 关于螺旋轴  $3_2$  的对称操作

至于中性螺旋轴,若按右旋方式旋转  $\alpha$  后,移距为  $(n/2)T$ 。而按左旋方式旋转  $\alpha$  后,移距仍为  $\left(1 - \frac{(n/2)}{n}\right)T = (n/2) \cdot T$ 。

晶体结构中所出现的螺旋轴见图 8-14,表 8-2 列出了螺旋轴的图示符号及部分对称要素的组合。

### (3) 滑移面与反映加平移操作

滑移面 (glide reflection plane 或 glide plane) 也叫像移面或滑移对称面,是晶体结构中一个假想的平面和平行该平面的一条直线方向,相应的对称操作是对平面的反映和沿直线方向的平移。当结构对此平面反映,并平行此平面移动一定距离后,构造中的每一个点与其相同的点重合,整个构造自相重合。

按照滑移的方向和距离可将滑移面分为  $a, b, c, n, d$  等

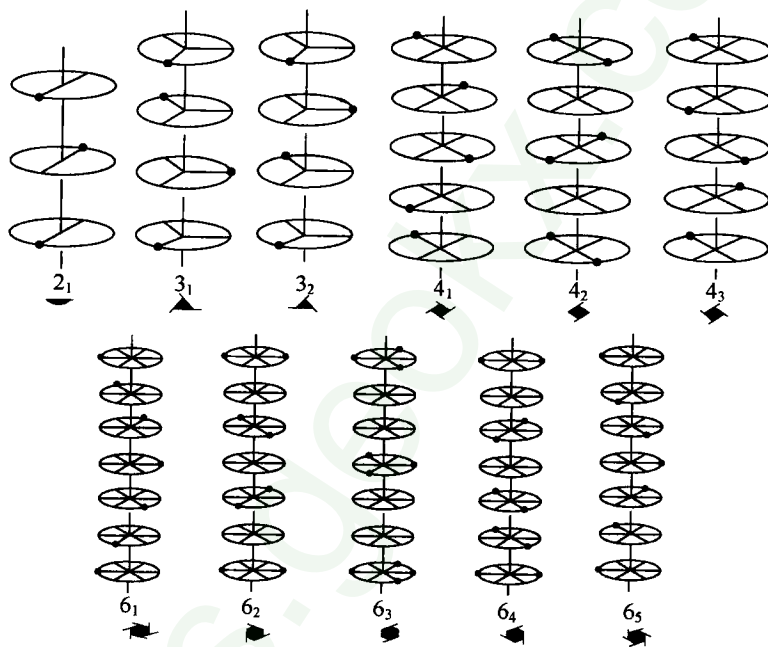


图 8-14 晶体结构中的螺旋轴

5 种。其中  $a, b, c$  为轴向滑移,滑移矢量分别为  $a/2, b/2, c/2$ ;  $n$  为对角线滑移,移距为  $(a+b)/2, (a+c)/2, (b+c)/2, (a+b+c)/2$  等;  $d$  为金刚石型滑移,移距为  $(a+b)/4, (a+c)/4, (b+c)/4, (a+b+c)/4$  等。

以上各种滑移面及对称面的国际符号、图示符号,滑移方向及距离等一并列表 8-3 中。

## 2. 空间群

空间群 (space group) 是晶体内部结构所有对称要素的组合。由于晶体内部结构出现了平移轴、螺旋轴、滑移面等包含平移操作的对称要素,空间群的数目便远大于点群的数目,达 230 种 (表 8-4)。它是先后由费德洛夫 (E. C. Фёдоров, 1889) 和申弗利斯 (A. M. Schönflies, 1891) 独

表 8-2 晶体结构中各种对称轴螺旋轴及部分对称要素组合的图示符号

与图面的关系	图示符号	国际符号	与图面的关系	图示符号	国际符号	备 注
与图面垂直		2	与图面平行		2	① $\bar{1}$ 等效于对称中心 ② $\bar{2}$ 等效于对称面
		2 <sub>1</sub>			2 <sub>1</sub>	
		3			4	
		3 <sub>1</sub>			4 <sub>1</sub>	
		3 <sub>2</sub>			4 <sub>2</sub>	
		4			4 <sub>3</sub>	
		4 <sub>1</sub>			$\bar{4}$	
		4 <sub>2</sub>				
		4 <sub>3</sub>				
		6				
		6 <sub>1</sub>	与图面斜交		$\bar{2}$	③ 与图面斜交的对称轴、螺旋轴的图示符号仅在等轴晶系之晶体结构投影图中出现
		6 <sub>2</sub>			2 <sub>1</sub>	
		6 <sub>3</sub>			3	
		6 <sub>4</sub>			3 <sub>1</sub>	
		6 <sub>5</sub>			3 <sub>2</sub>	
		$\bar{1}$			3	
		$\bar{3}$				
		$\bar{4}$				
		$\bar{6}$				
		2/m				
		2 <sub>1</sub> /m				
		4/m				
		4 <sub>2</sub> /m				
		6/m				
		6 <sub>3</sub> /m				

立推导出来的,故空间群亦称为费德洛夫群(Fedorov group)或申弗利斯群(A. M. Schoenflies group)。

空间群是在点群基础上推导出来的:在空间格子的各结点上放置点群(即相应晶体的外部各种对称要素),它们通过空间格子中的平移操作而相互作用,产生出另外一些对称要素,形成一部分空间群,叫点式空间群;之后,在点式空间群的基础上用螺旋轴、滑移面代替对称轴、对称面,又可产生另一些空间群,叫非点式空间群。每一点群可产生多个空间群,所以 32 个点群可产生 230 种空间群。

空间群与点群(对称型)分别是晶体结构对称与晶体外形对称的反映。每一个点群有若干种空间群与之相适应,即外形上属于同一对称型的晶体,其内部结构可分属于若干空间群(表 8-4)。以对称型 4( $L^4$ )为例:从内部结构来看,它属于四方晶系,可存在两种空间格子,即四方原始格子(P)和四方体心格子(I);而外形上的四次对称轴 4( $L^4$ ),在晶体内部结构中可能是 4, 4<sub>1</sub>,