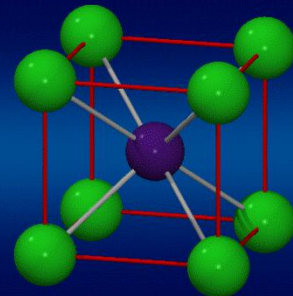


陕西国际商贸学院珠宝学院

Gemmological institute of Shaanxi Institute of international trade&commerce

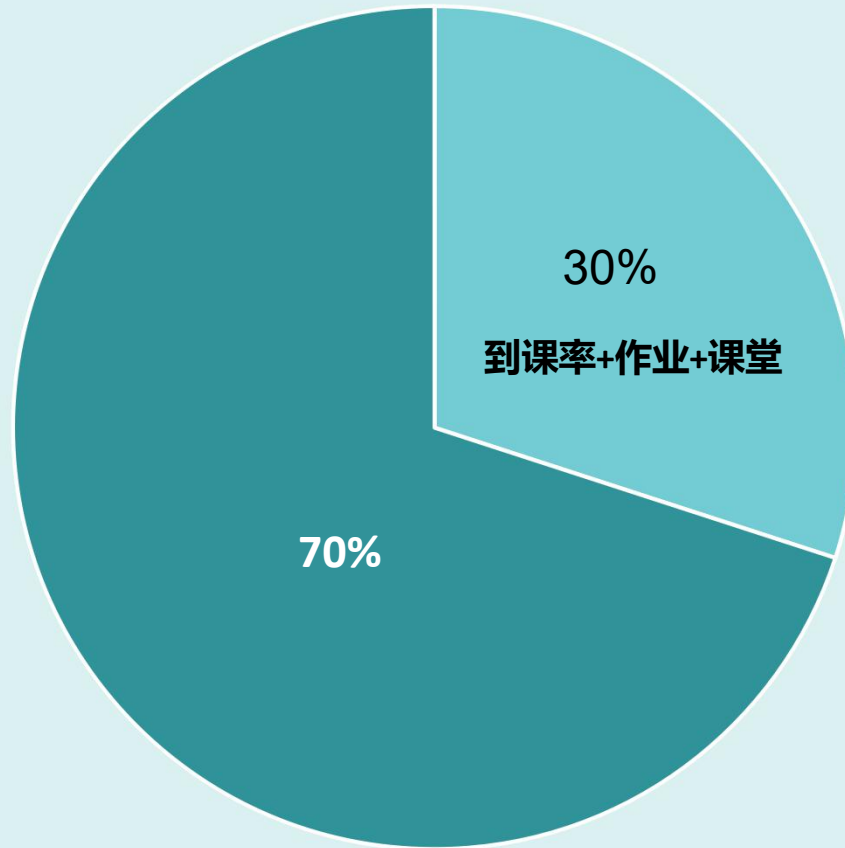


《 结 晶 学 》

主讲教师：杨 蓉

2018 年 6 月

课程考核方式



30%
到课率+作业+课堂

70%

■ 平时成绩 ■ 期末成绩



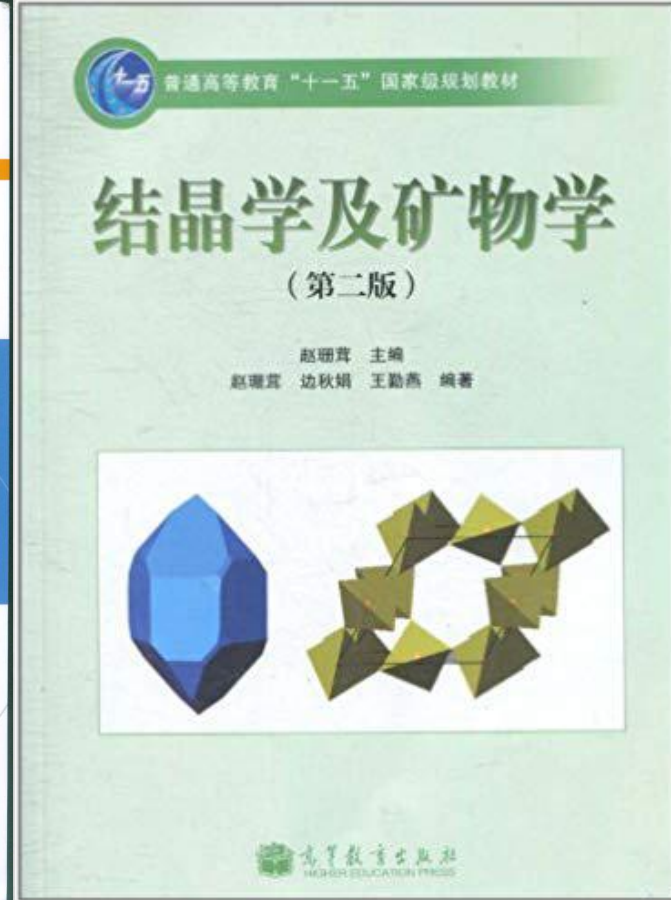
教参推荐



(叶松等, 中国地质大学出版社)



(李胜荣等, 地质出版社)



(赵珊荣等, 高等教育出版社)



课程简介

01 几何结晶学

- 研究晶体外部形态及其规律，主要是对称规律。

02 晶体结构学

本课程以学习**晶体形态对称规律**及**晶体内部结构对称规律**为主，简介晶体化学等方面的知识。

03 晶体化学

- 研究晶体发芽、生长和变化过程与机理。

04 晶体物理学

- 研究晶体物理性质及其产生机理。



课程简介

章目	教学内容
第一章	晶体与晶体的基本性质
第二章	晶体的生长模型与面角守恒定律
第三章	晶体的外部对称
第四章	晶体的定向与晶体符号
第五章	单形和聚形
第六章	晶体的规则连生
第七章	晶体结构简介
第八章	晶体化学

第一章 晶体与晶体的基本性质

目

1

晶体、非晶质体与准晶体的概念

2

空间格子

3

晶体的基本性质

录

01 晶体、非晶质体与准晶体的概念

1. 晶体的概念

能自发生长成**规则几何多面体**外形的固体称为晶体

远古定义



20世纪20年代人们利用X射线对晶体进行分析后发现，**组成晶体的质点在空间是按规律分布的。**

定义的发展

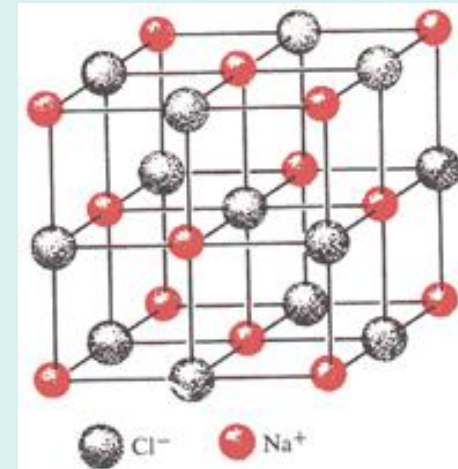
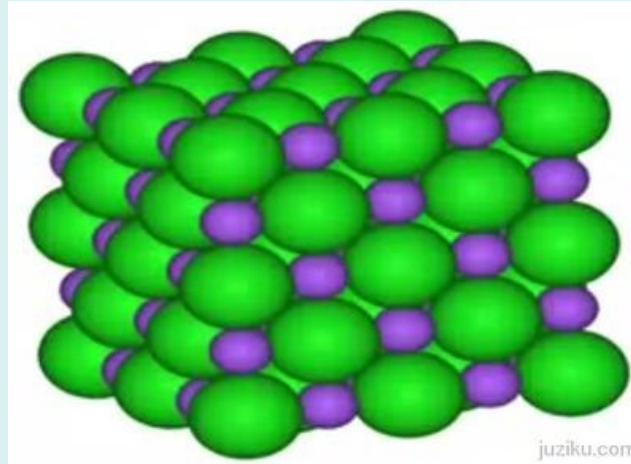


晶体是内部质点(原子、离子或分子)在三维空间呈周期性平移重复排列而形成**格子构造**的固体，或者说，晶体是具有格子状构造的固体。

现代定义

01

晶体、非晶质体与准晶体的概念



01 晶体、非晶质体与准晶体的概念

2. 非晶质体的概念

与晶体相反，非晶质体是内部质点在三维空间**不呈周期性平移重复排列，不具有格子状**的构造规律。



01 晶体、非晶质体与准晶体的概念

3. 准晶体的概念

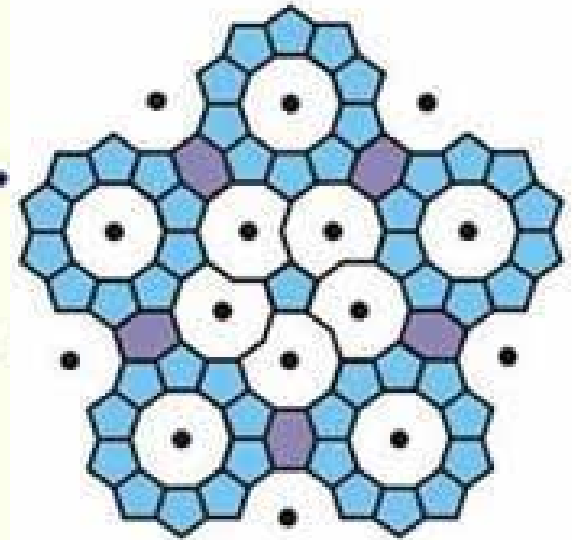
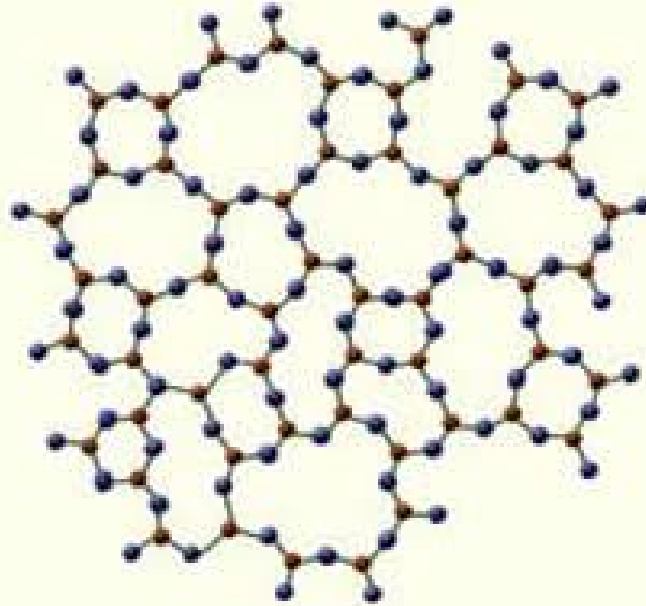
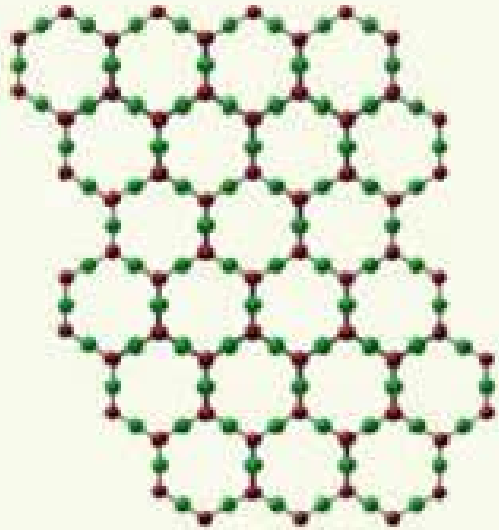
有完全有序
的结构

不具有晶体
所应有的平
移对称性

准晶体是一种介
于晶体和非晶体
之间的固体

01

晶体、非晶质体与准晶体的概念



具有近程规律，同时具有平移周期

晶体

无近程规律，没有平移周期

非晶体

具有近程规律，但没有平移周期，

准晶体

02 空间格子



2.1 空间格子的概念

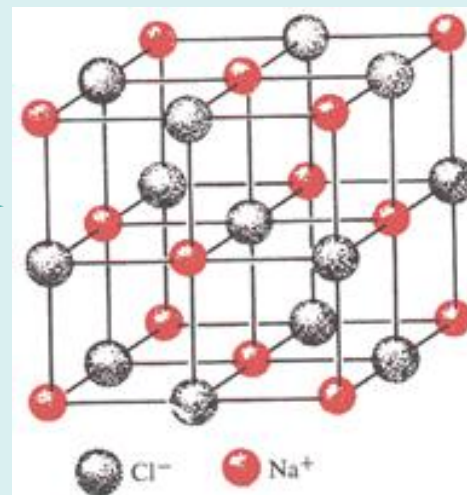
2.2 空间格子的导出

2.3 空间格子要素

3.1空间格子的概念

2. 空间格子

空间格子是晶体内部结构中质点在三维空间作**周期性**
性平移重复排列形成的**无限几何图形**。



02

空间格子

2.1 空间格子的概念



2.2 空间格子的导出

2.3 空间格子要素

2.2 空间格子的导出

2. 空间格子

第一步

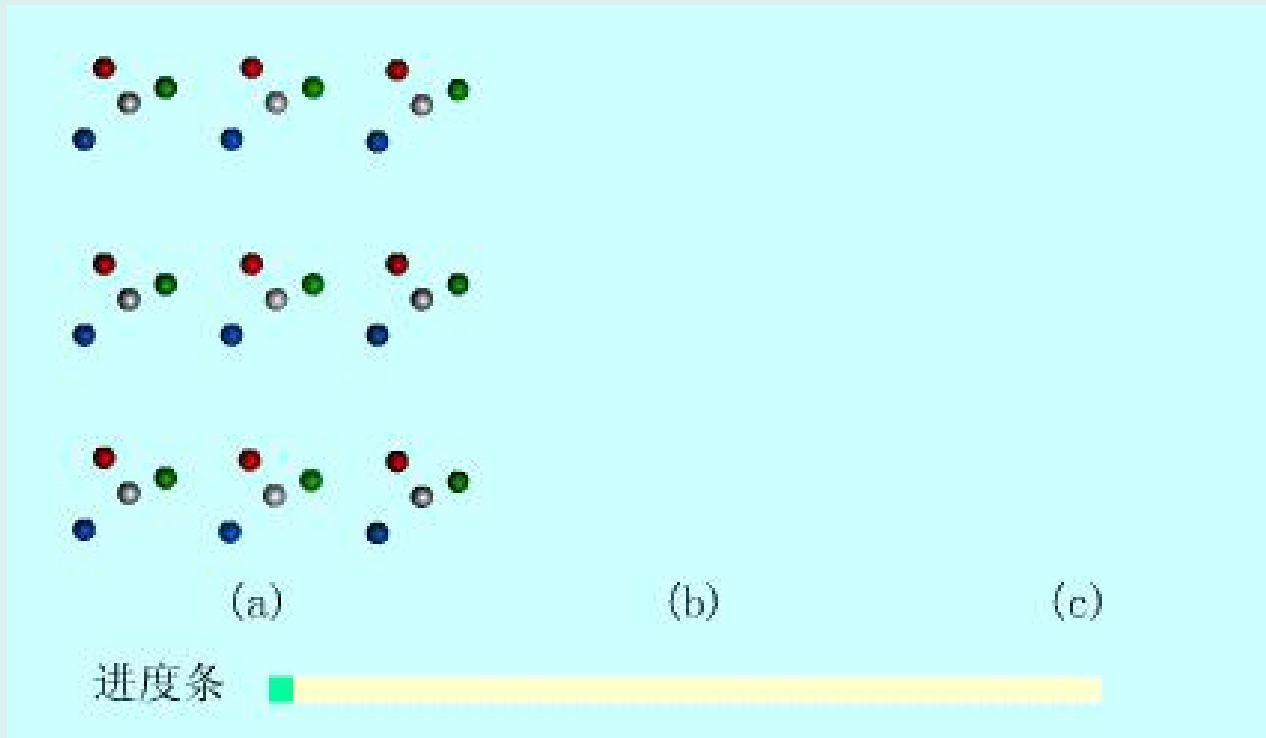
寻找**等同点**或**相当点**；

第二步

将**一类等同点**最近连接得到无限几何图形；

第三步

无数类等同点连接，取其中一个无限几何图形构成一个晶体结构的**空间格子**。



02 空间格子

2.1 空间格子的概念

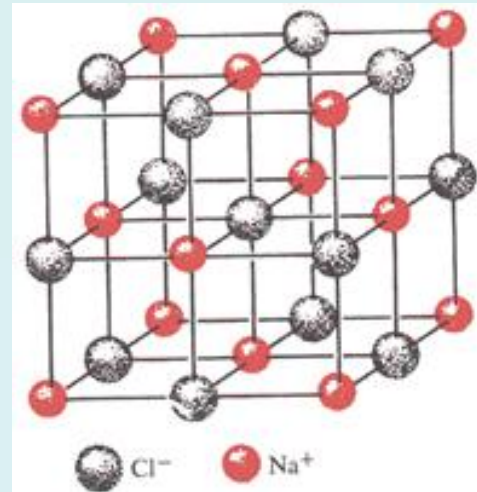
2.2 空间格子的导出



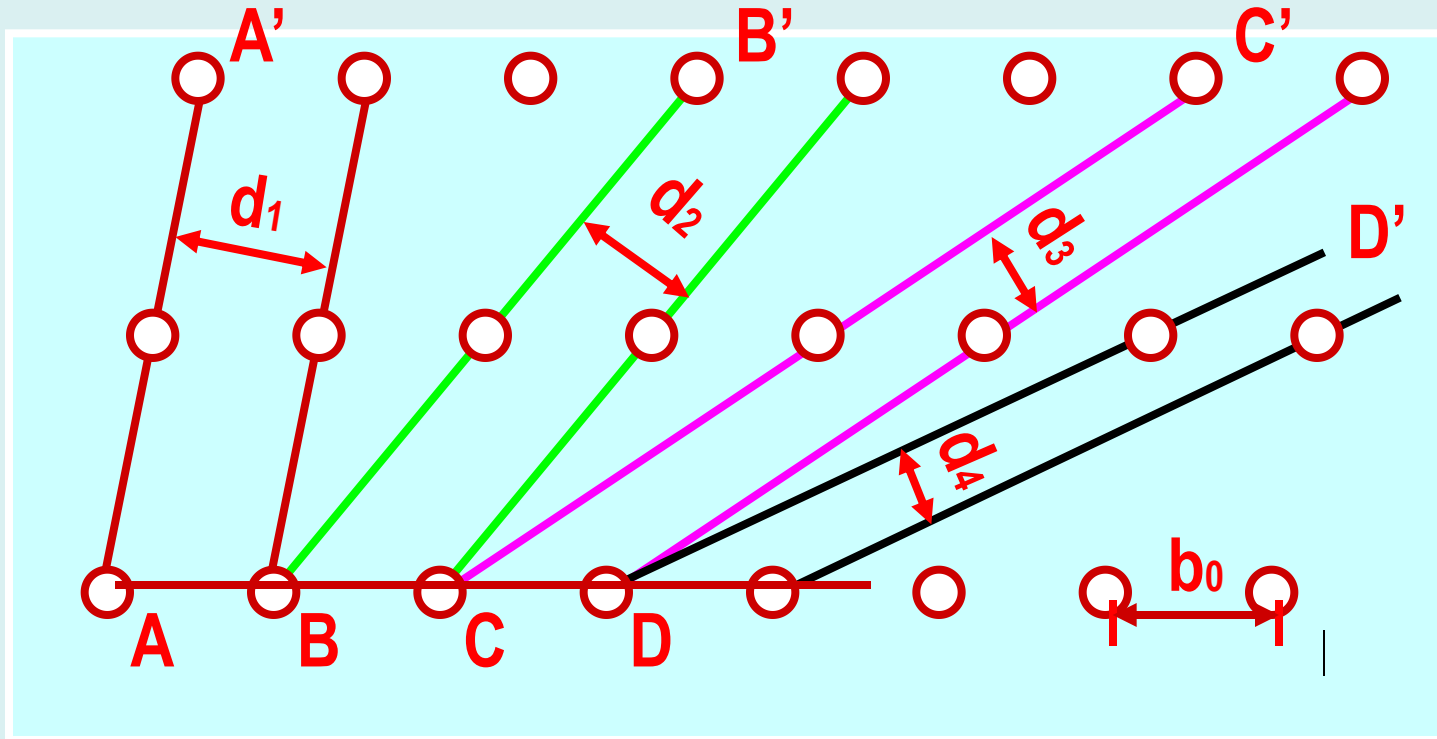
2.3 空间格子要素

2.3 空间格子要素

2. 空间格子



- 节点 空间格子上得等同点
- 行列 空间格子上节点组成的直线
- 面网 连接空间格子中分布在同一平面内的节点，即构成一个面网。
 - 面网间距：两个相邻面网间的垂直距离
 - 面网密度：单位面积内的节点数目
- 平行六面体 空间格子的最小单位，由6个两两平行且相等的面组成。



面网AA'间距 d_1

面网BB'间距 d_2

面网CC'间距 d_3

面网DD'间距 d_4

减小

面网间距依次减小,面网密度也是依次减小的.

所以:面网密度与面网间距成正比.

03 晶体的基本性质

1. 最小内能性

在相同的热力学条件下，晶体与同种物质的非晶体、气体、液体相比，内能最小。

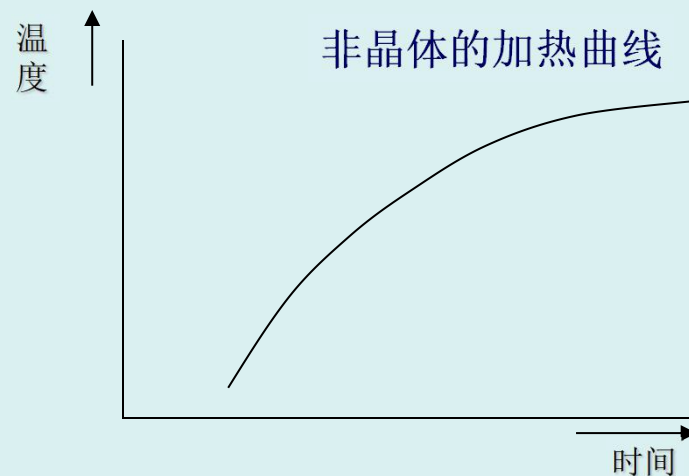
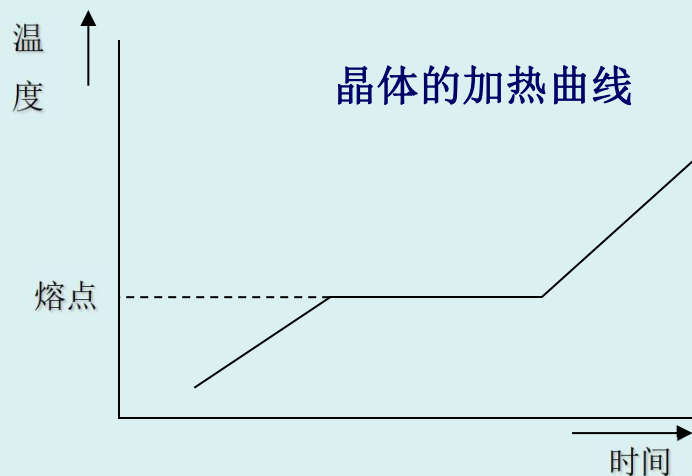
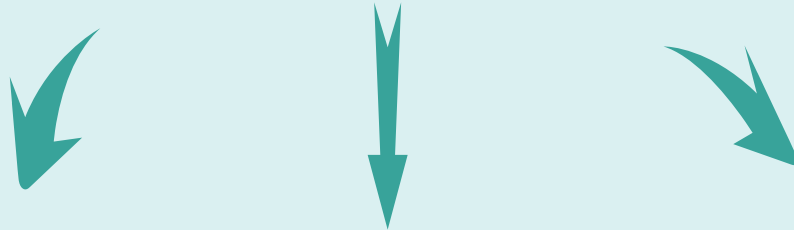


图 晶体与非晶质体的加热曲线示意图

03 晶体的基本性质

2. 稳定性

晶体由于具有最小内能



在没有外加能量的情况下，晶体是不会自发的向其他物理状态转变。



晶体比非晶体、气体、液体稳定。

03 晶体的基本性质

3. 对称性

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**。

例如下面的晶体形态是对称的：

03 晶体的基本性质

4. 异向性

晶体的性质也随方向的不同而有所差异。

例如： 蓝晶石的不同方向上硬度不同。



5. 均一性

同一晶体的不同部分物理化学性质完全相同。

注：晶体是绝对均一性，非晶体是统计的、平均近似均一性。

03 晶体的基本性质

6. 自限性

适宜的空间条件下，晶体能够自发地生长成规则的几何多面体形态的性质。



质点按空间格子的周期性重复规律排列



六面体



十二面体

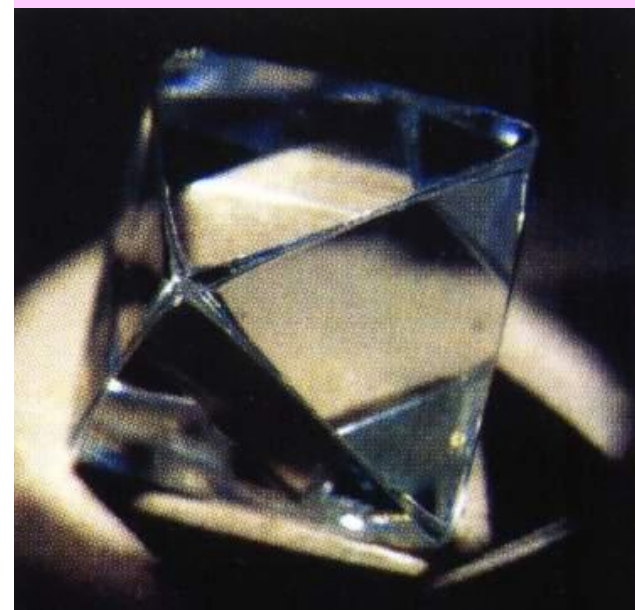


四面体



三角形扁平双晶

各种晶体形状的
金刚石晶体



八面体

本章重点

- 1) 晶体、非晶体、准晶质, 空间格子等概念。
- 2) 空间格子要素
- 3) 晶体的基本性质

思考

- 生活中哪些是晶体？哪些为非晶体？
- 从格子构造观点出发，说明晶体的基本性质。



第二章

晶体的生长模型与面角守恒定律

本章提 纲

1

晶体生长的途径

2

晶体的层生长与螺旋生长

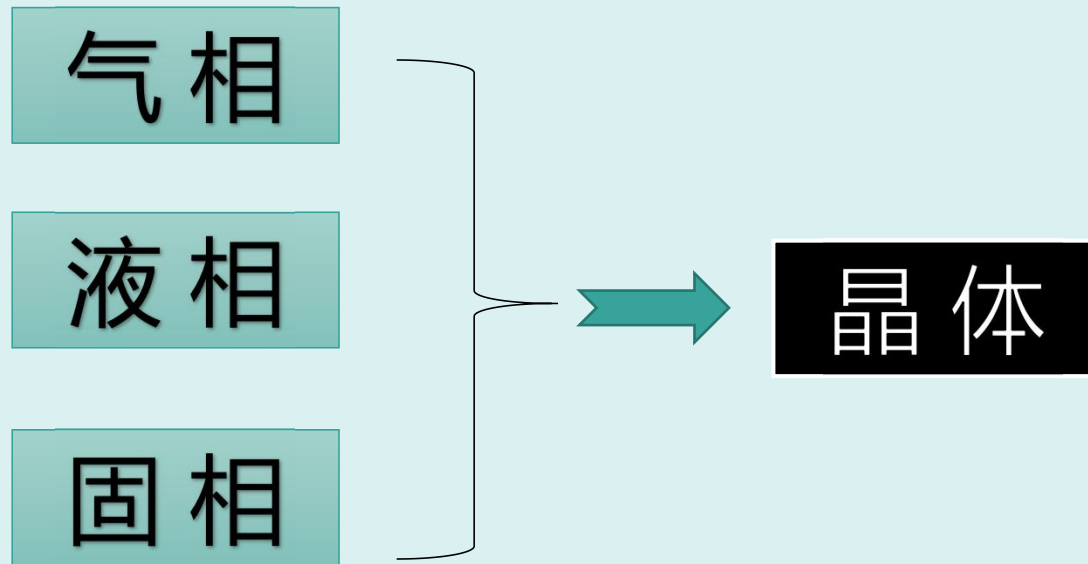
3

晶面发育的布拉维法则

4

面角守恒定律

01 晶体生长的途径



1.1由气相转变为晶体

1.晶体生长的途径



典型实例:



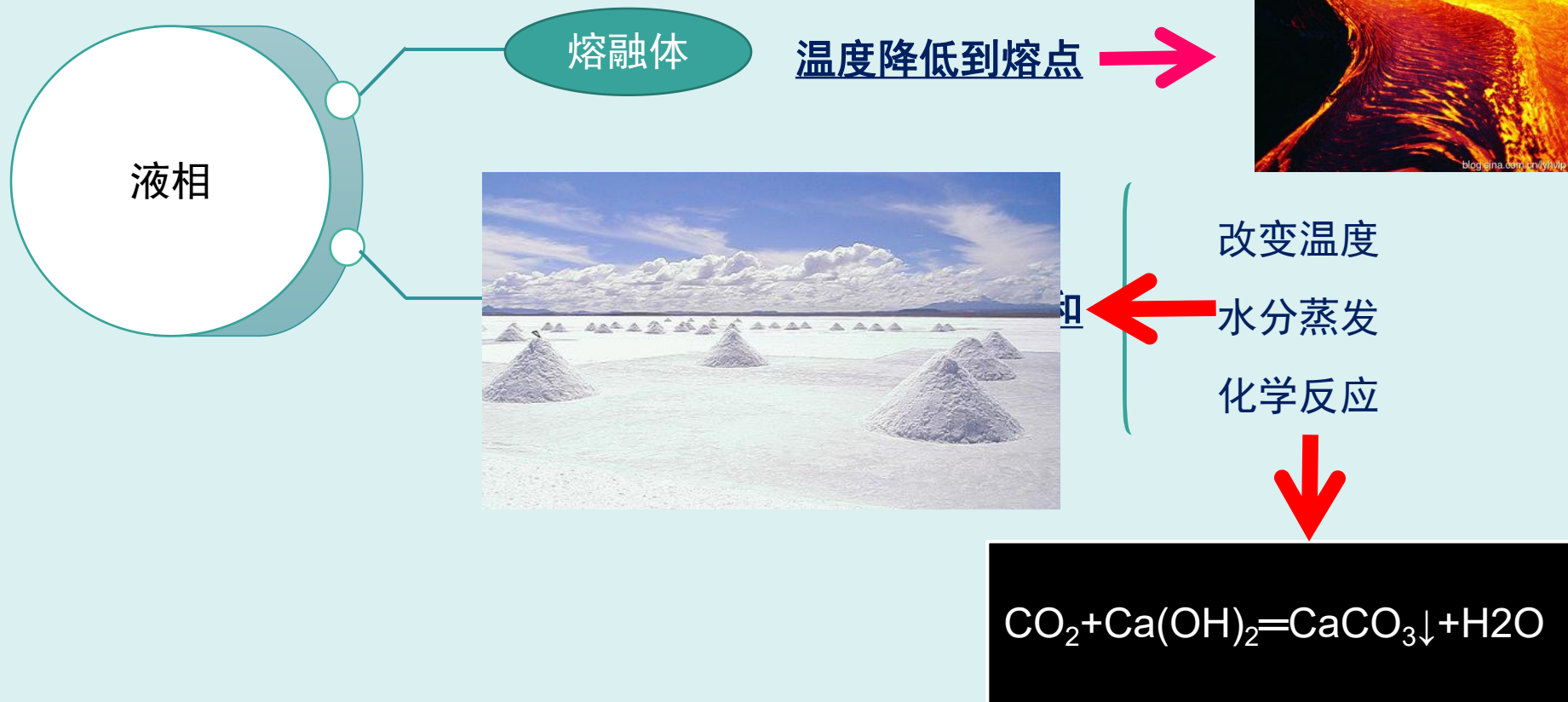
火山口喷气凝华形成自然硫、碘或氯化钠晶体



雪花、雾凇

1.2由液相转变为晶体

1.晶体生长的途径



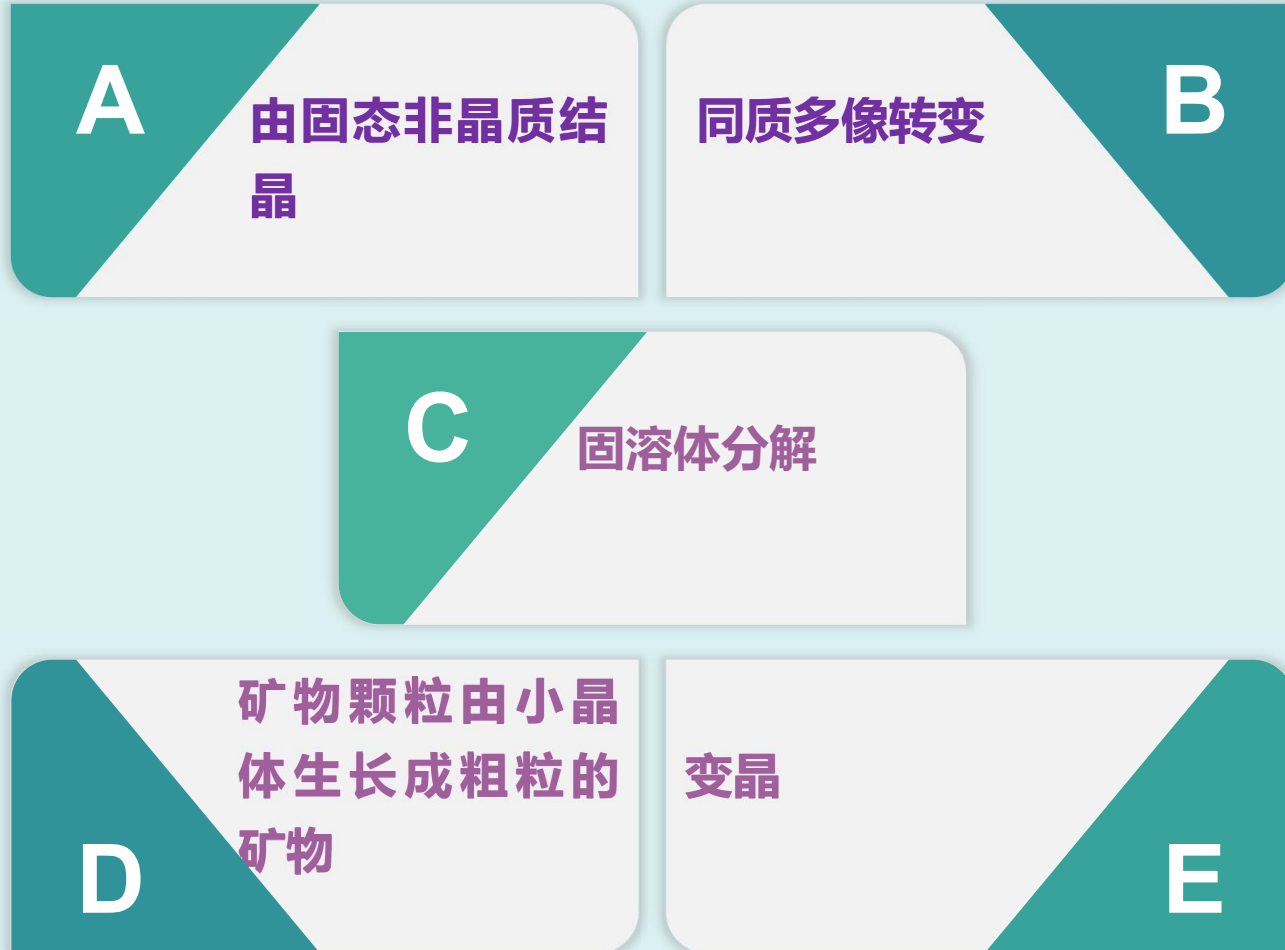
1.2由液相转变为晶体

1.晶体生长的途径



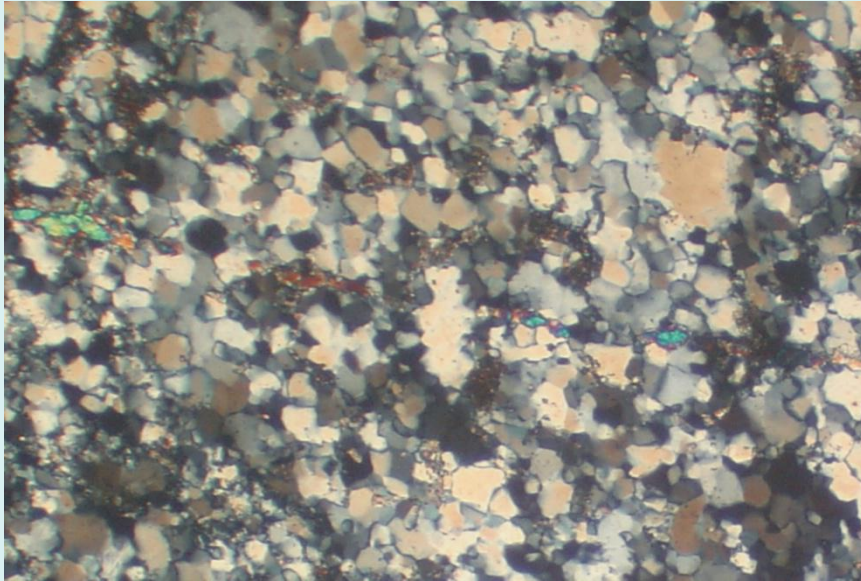
1.3由固相转变为晶体

1.晶体生长的途径

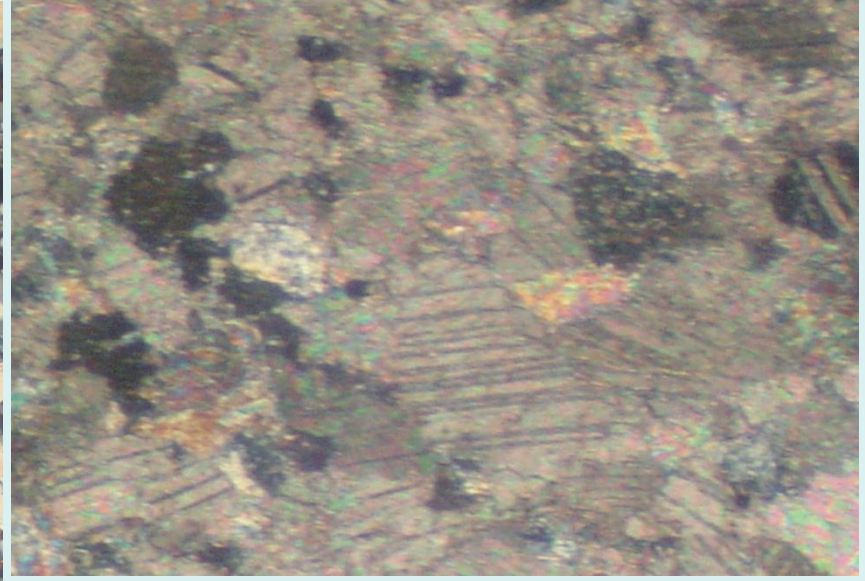


1.3由固相转变为晶体

1.晶体生长的途径

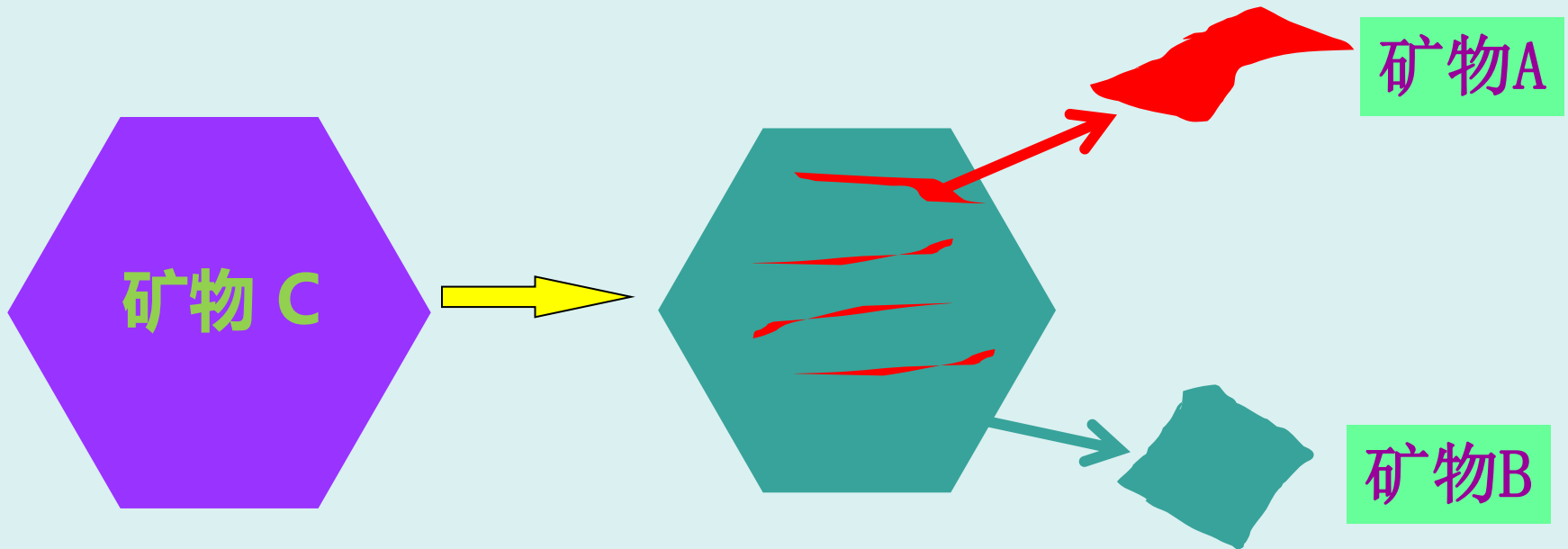


石英细砂岩重结晶变为石英岩



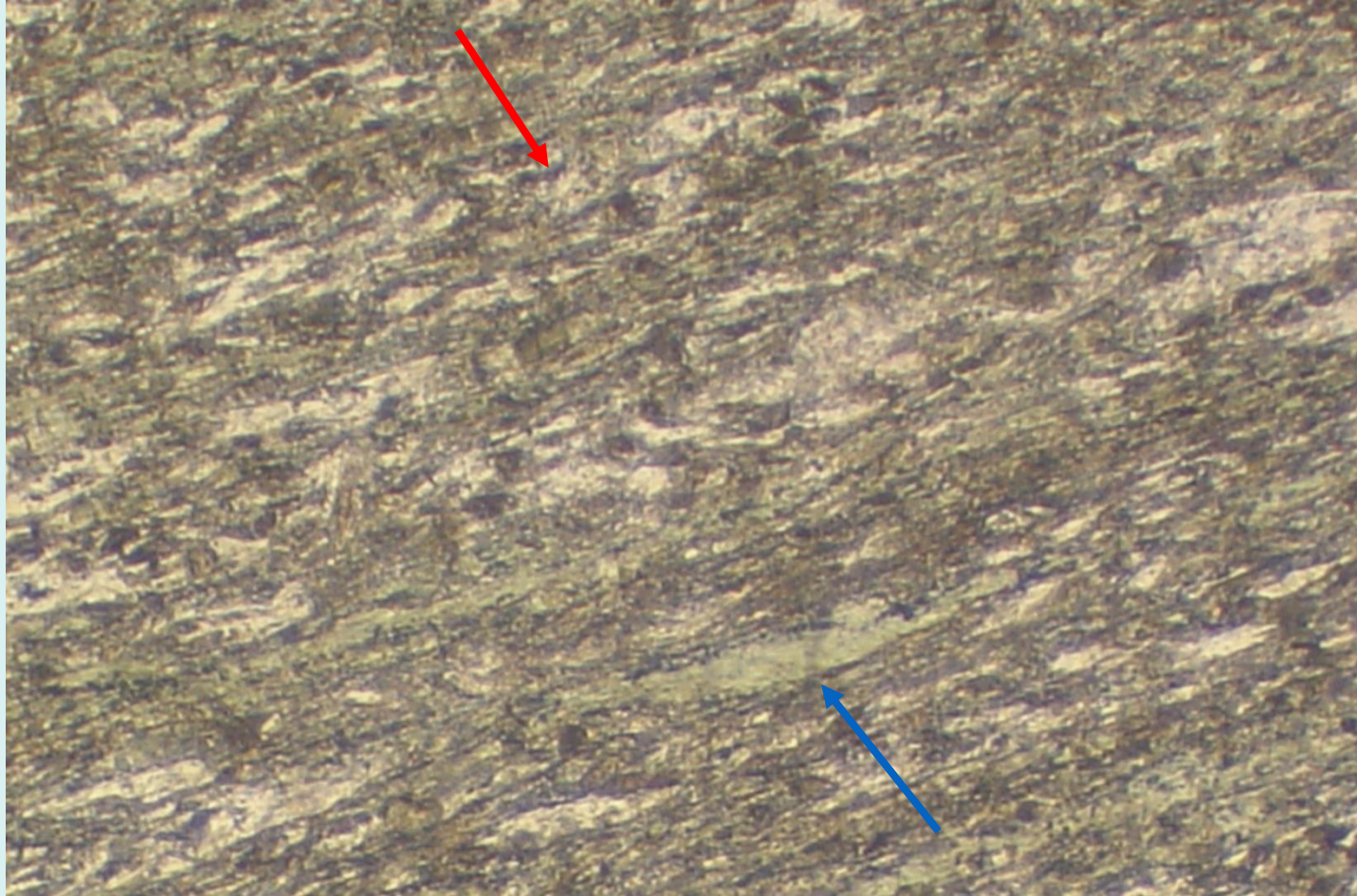
灰岩重结晶变为大理岩

固溶体分离



1.3由固相转变为晶体

1.晶体生长的途径



(阳起石片岩变晶结构)

02

晶体的生长理论

- 2.1 晶核的形成
- 2.2 晶体的层生长模型
- 2.3 晶体的螺旋生长模型

2.1晶核的形成

1.晶体的生长理论

晶体形成的三个阶段

①介质达到过饱和、
过冷却阶段；



③晶体生长阶段。



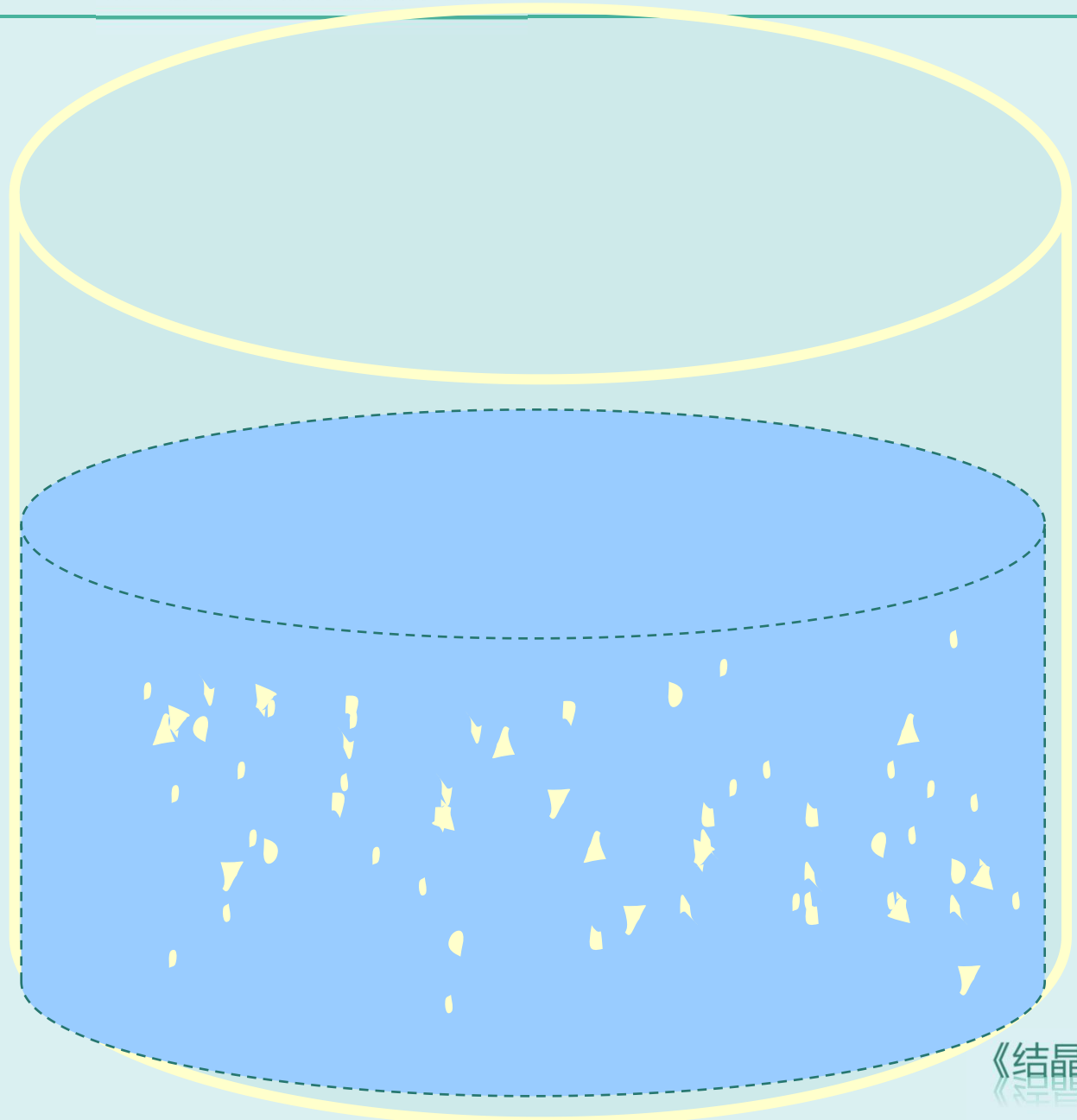
②成核阶段；



2.1晶核的形成

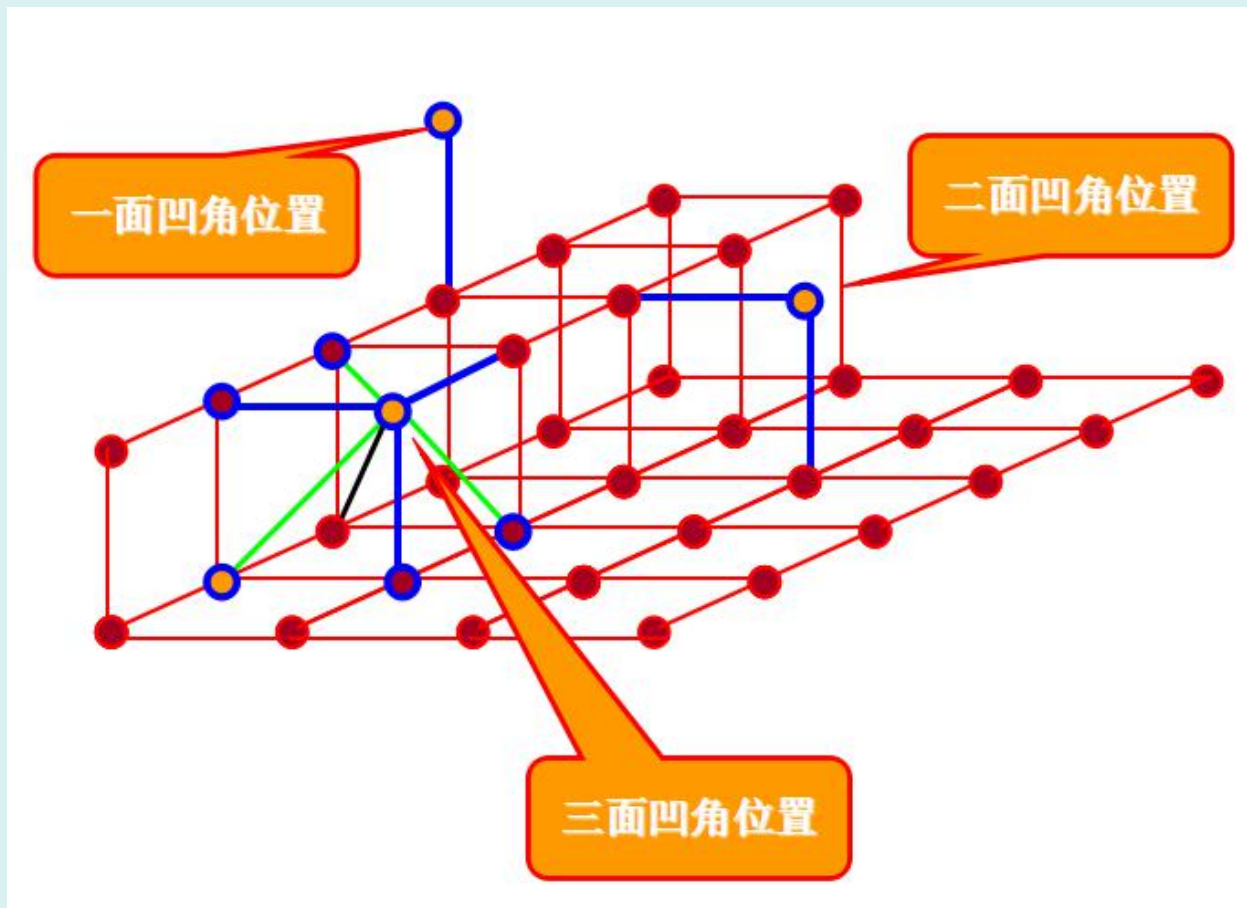
1.晶体的生长理论

晶核的形成



2.2晶体的层生长理论

2.晶体的生长理论

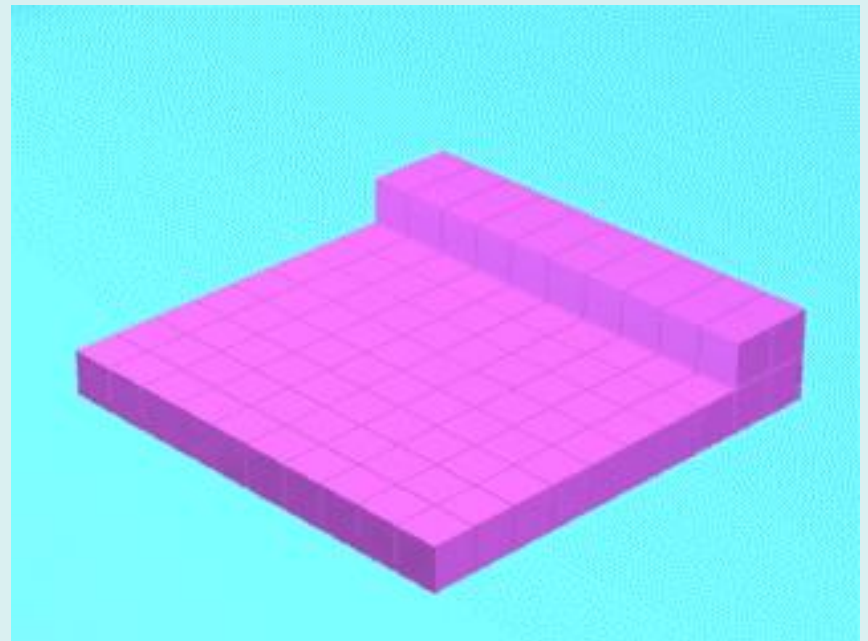
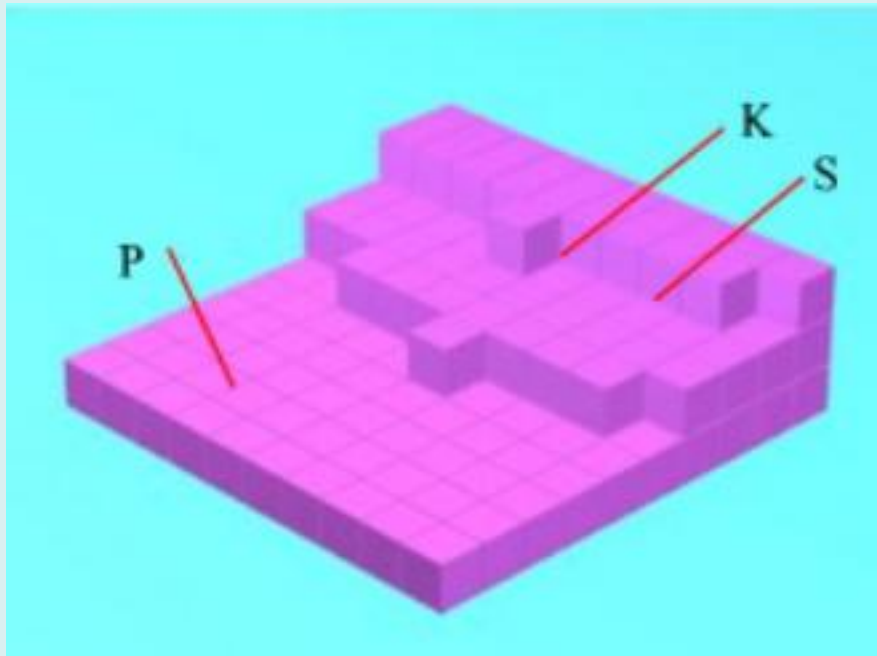


先在**三面凹角**上生长成一行，以至于三面凹角消失，再在**两面凹角**处生长一个质点，以形成三面凹角，再生长一行，重复下去，一层一层往外生长——层生长理论。

2.2晶体的层生长理论

2.晶体的生长理论

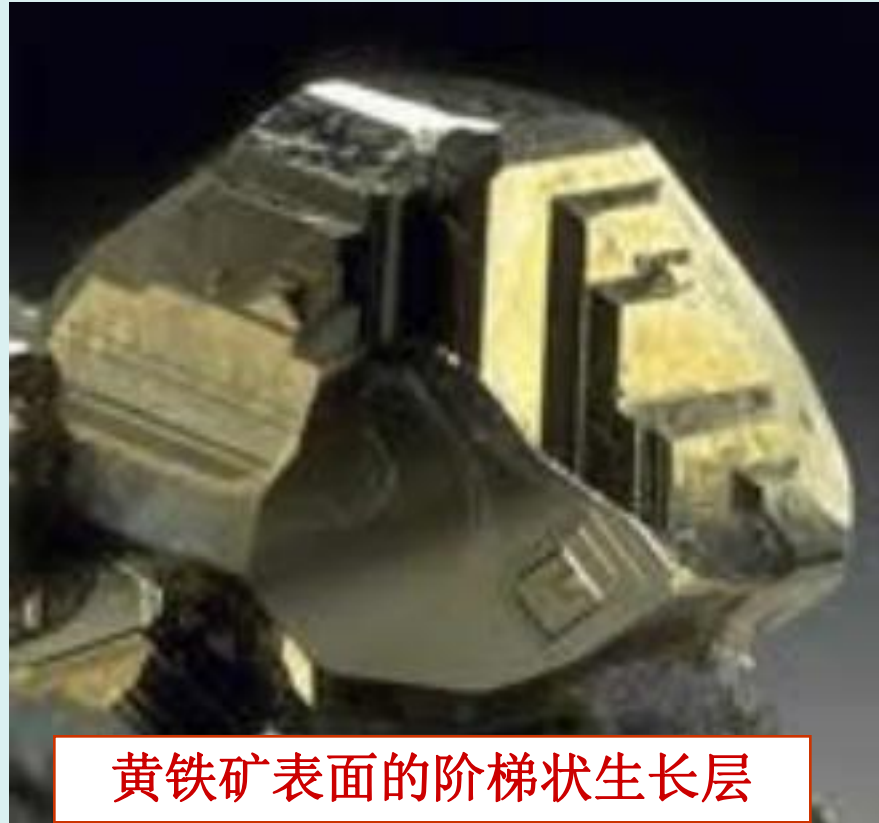
层生长理论示意图



2.2晶体的层生长理论

2.晶体的生长理论

层生长理论的证据：



黄铁矿表面的阶梯状生长层

2.2晶体的层生长理论

2.晶体的生长理论

层生长理论的证据：



石英的生长纹

2.2晶体的层生长理论

2.晶体的生长理论

层生长理论的不足：

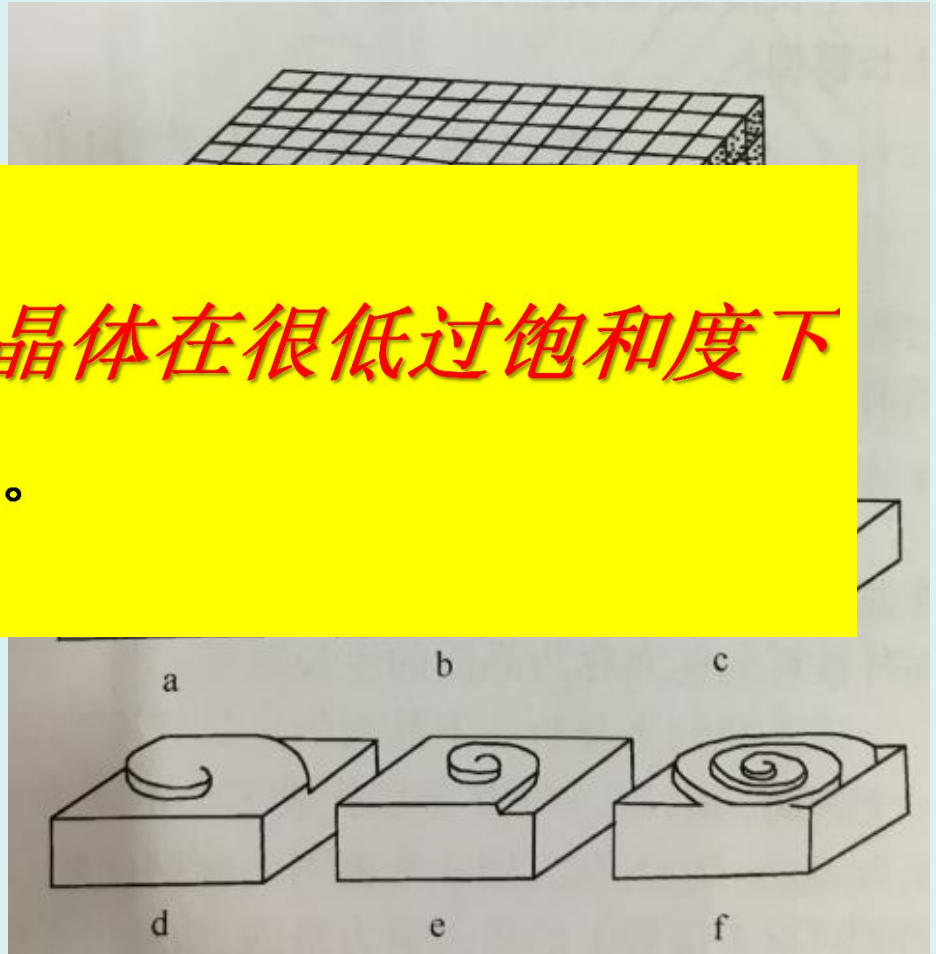
当将这一界面上的所有最佳生长位置都生长完后，如果晶体还要继续生长，就必须在这一平坦面上先生长一个质点，由此来提供最佳生长位置。这个先生长在平坦面上的质点就相当于一个二维核，形成这个二维核**需要较大的过饱和度，但许多晶体在过饱和度很低的条件下也能生长。**

2.3晶体的螺旋生长理论

2.晶体的生长理论

在螺
以作
可以
催化
不消失，因此不需要形成
二维核。

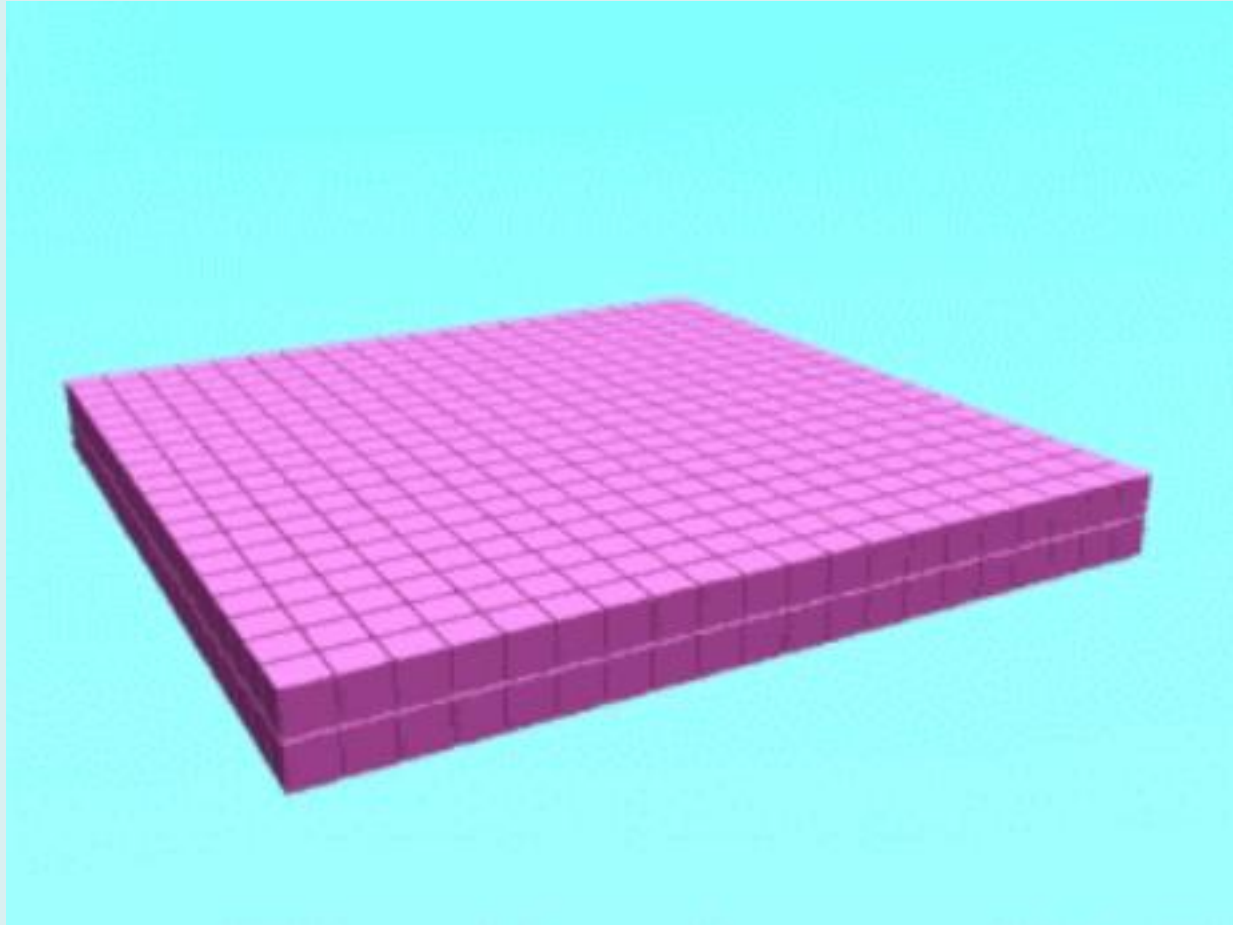
这样便成功地解释了**晶体在很低过饱和度下仍能生长**这一现象。



2.3晶体的螺旋生长理论

2.晶体的生长理论

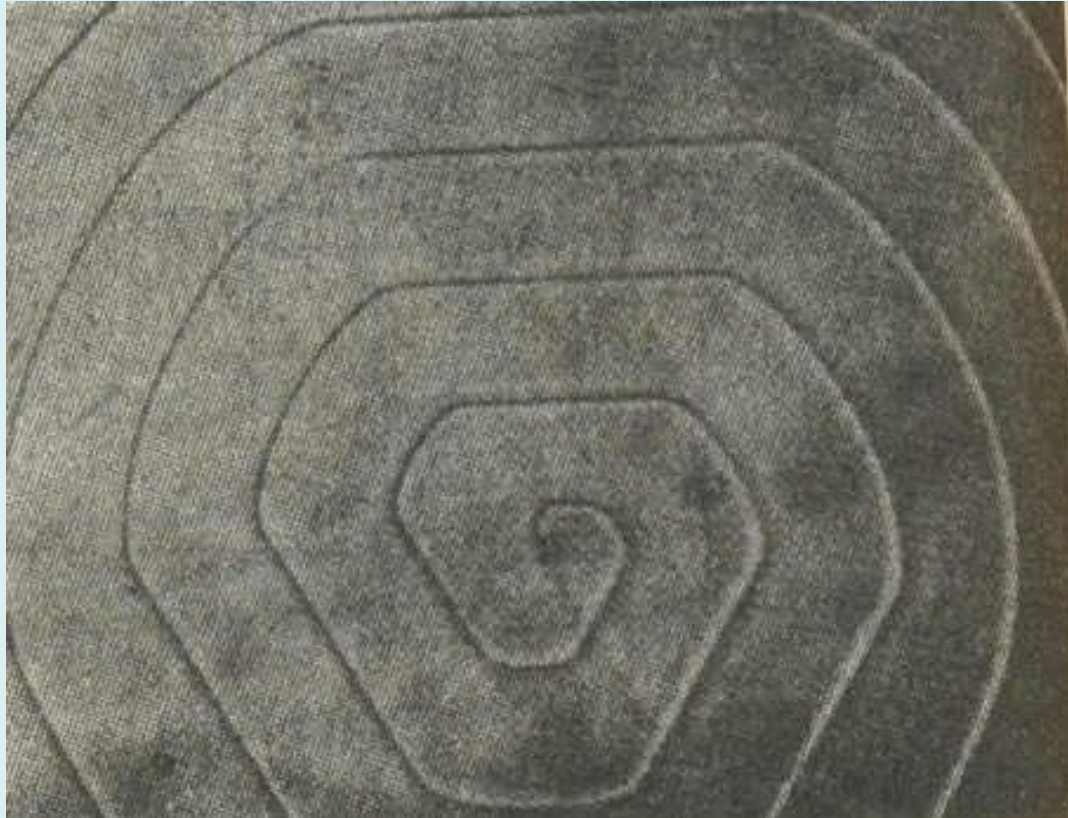
螺旋生长过程



2.3晶体的螺旋生长理论

2.晶体的生长理论

螺旋生长理论的证据：



SiC晶体表面的生长螺旋

03

晶面发育的布拉维法则

是什么

晶体上的实际晶面往往平行于格子构造中面网密度大的面网。

为什么

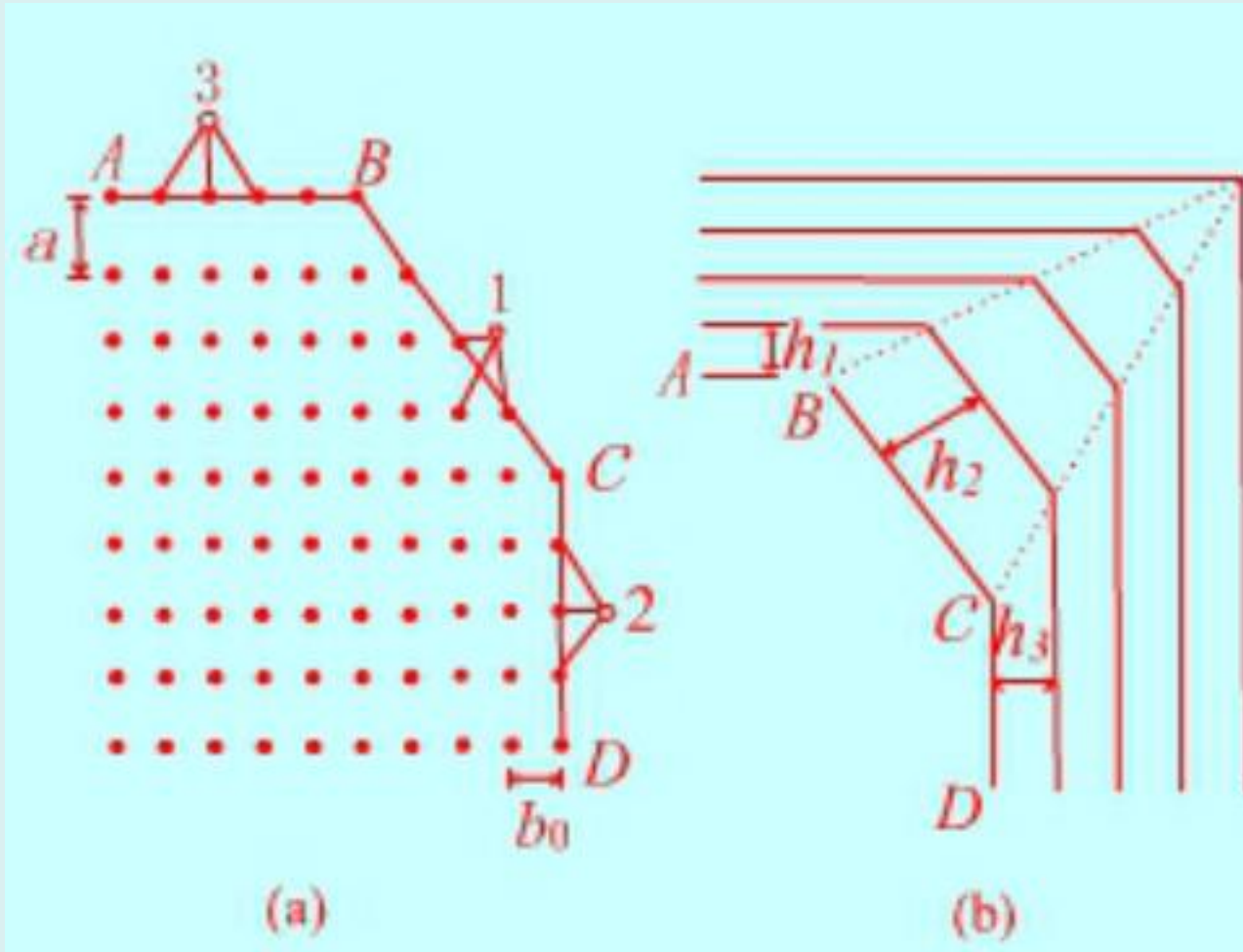
面网密度大—面网间距大—对生长质点吸引力小—生长速度慢。

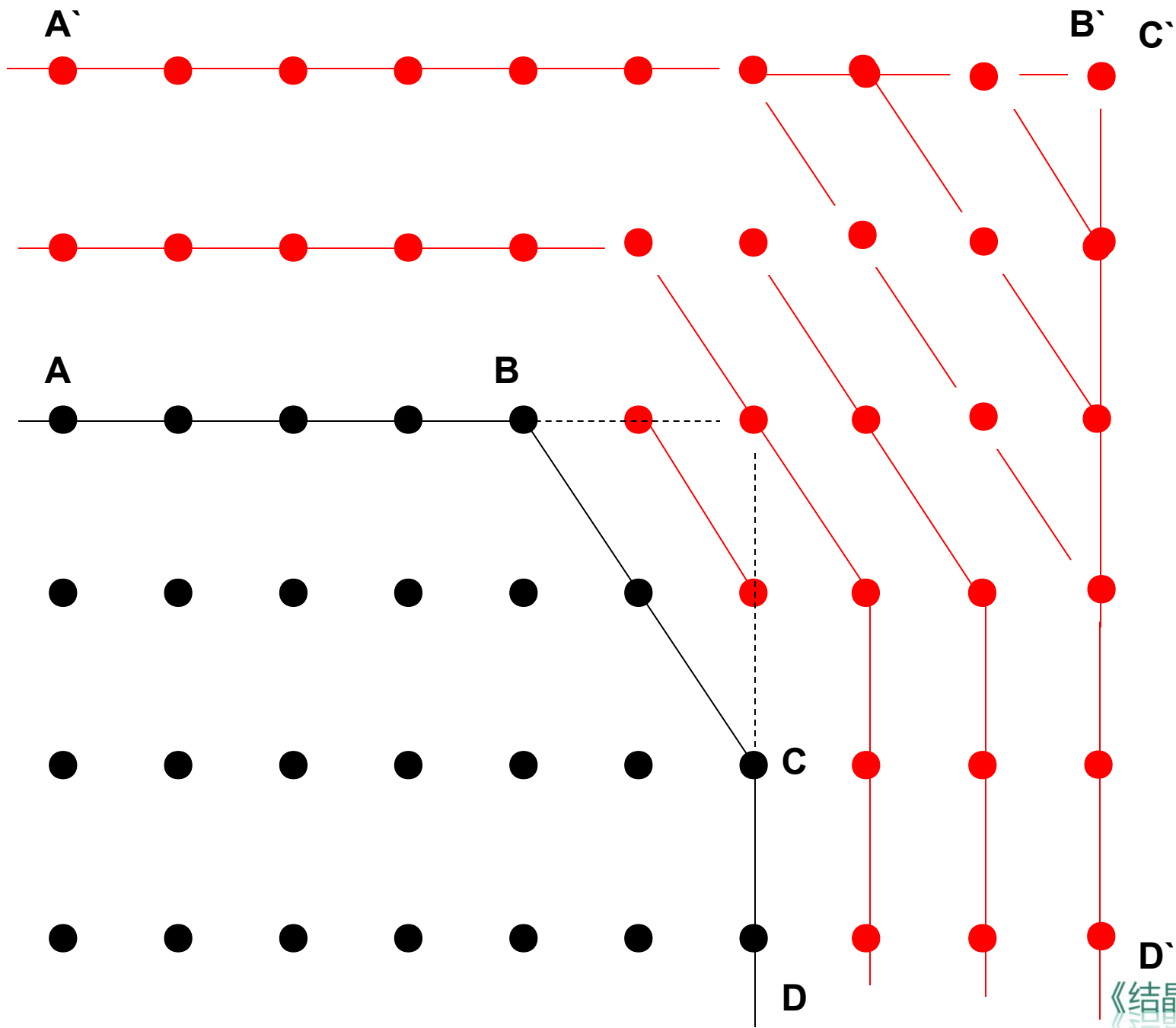
生长速度慢—在晶形上保留；

生长速度快—尖灭。

03

晶面发育的布拉维法则



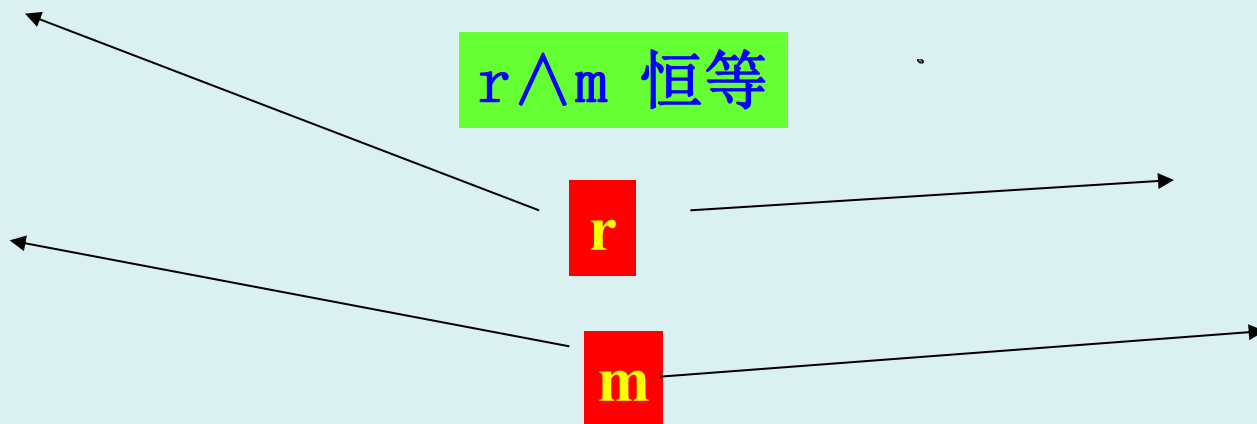


04 面角守恒定律

在相同的温度、压力条件下，成分和结构相同的所有晶体对应的晶面间的面角恒定。



由于晶面是平行向外推移，所以同种矿物不同晶体上对应晶面的夹角恒等



小结

- 1.晶体的生长理论:
- 2.晶面发育的布拉维法则
- 3.面角守恒定律



思考



- ◆ 层生长理论与螺旋生长理论在解释晶体生长时各有哪些优缺点？
- ◆ 为什么小颗粒矿物晶面多、形态复杂，而大晶体晶面数目少，形态简单？

第三章 晶体的外部对称

目

晶体对称的概念

01

晶体对称的特点

02

晶体的外部对称要素及其操作

03

录

01 晶体对称的概念



对称就是物体相同部分有规律的重复。在自然界和日常生活中，对称现象是广泛存在的。



01 晶体对称的概念

对称就是物体相同部分有规律的重复。



晶体的外部对称晶体的晶面、晶棱和角顶等有规律的重复。

02

晶体对称的特点

所有的晶体结构都是对称的



通过平移，可使相同质点重复



晶体是具有
格子构造的
固体

晶体的对称
受格子构造
规律的限制

晶体的对称不仅体现在
外形上，同时也体现在
物理性质和化学组成方
面

晶体的对称
是有限的

03

晶体的外部对称要素及其操作

对称操作：使对称图形中相同部分重复的操作。

对称要素：在进行对称操作时所应用的辅助几何要素（点、线、面）。

03

晶体的外部对称要素及其操作

- 对称面与反映操作
- 对称轴与旋转操作
- 对称中心与反伸操作
- 旋转反伸轴与旋转加反伸操作

3.1 对称面与反映操作

3.晶体的外部对称要素及其操作

- 对称面为一假想的通过晶体几何中心的平面，与之相应的对称操作为对此平面的反映。



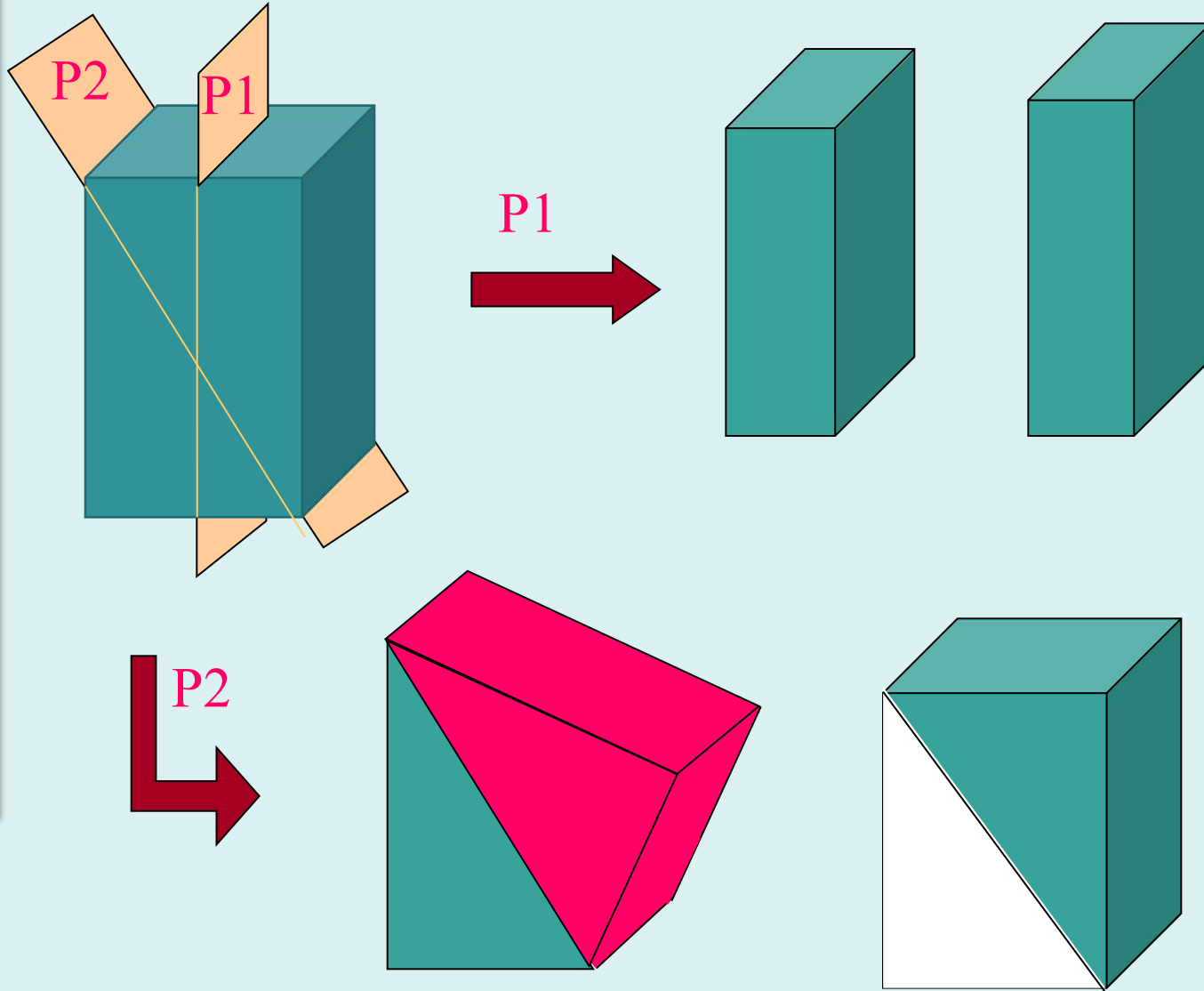
由对称面将物体平分后的两个相等部分彼此互成镜像的关系。

对称面以P表示，有一个对称面记作P，有多个对称面时，数字写在前面，如2P。

3.1 对称面与反映操作

3.晶体的外部对称要素及其操作

P1、P2 是对称面吗？



3.1 对称面与反映操作

3. 晶体的外部对称要素及其操作

对称面可能出现的位置：



- 1、垂直并平分晶面；
- 2、垂直晶棱并通过它的中心；
- 3、包含晶棱

注意：一个晶体上可以不存在对称面，也可以有一个或者多个对称面，但最多不超过9个

03

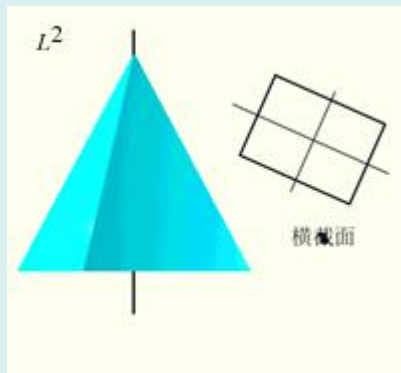
晶体的外部对称要素及其操作

- 对称面与反映操作
- 对称轴与旋转操作
- 对称中心与反伸操作
- 旋转反伸轴与旋转加反伸操作

3.2对称轴与旋转操作

3.晶体的外部对称要素及其操作

- 对称轴为一根假想的通过晶体几何中心的直线，相应的操作为围绕此直线的旋转。



物体绕该直线每旋转一定的角度之后，可使物体各个相同部分重复，即整个物体重复一次。

3.2 对称轴与旋转操作

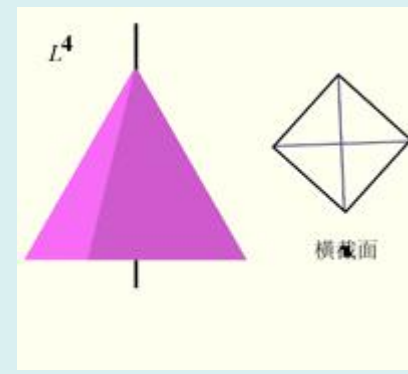
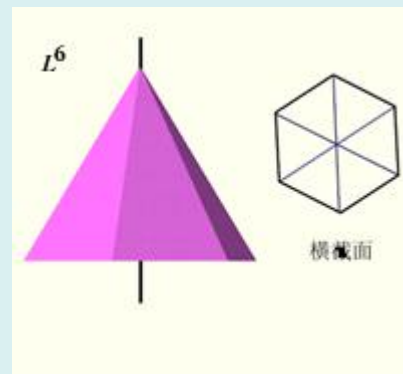
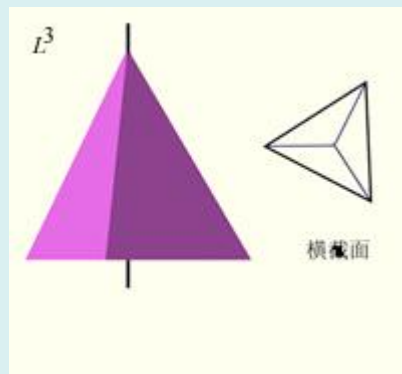
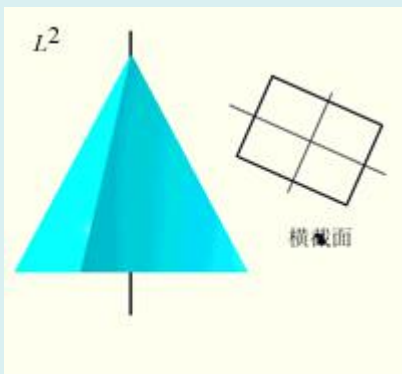
3.晶体的外部对称要素及其操作

对称轴的书写

- 对称轴以 L 表示，轴次 n 写在 L 的右下角上，写作 L^n ；
- 当有多个 L^n 存在时，数字写在前面，如 $3L^4$ ；
- 当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 $3L^44L^36L^2$ 。

3.2 对称轴与旋转操作

3.晶体的外部对称要素及其操作



轴次 $n > 2$ 的对称轴，称高次轴，包括 L^3 ， L^4 ， L^6 ；
轴次 $n \leq 2$ 的称低次轴，包括 L^2 。

3.2对称轴与旋转操作

3.晶体的外部对称要素及其操作

对称轴出露的位置

晶面中心/晶棱中心/晶体角顶

晶体上对称轴的出露位置（图据罗谷风，1985）

03

晶体的外部对称要素及其操作

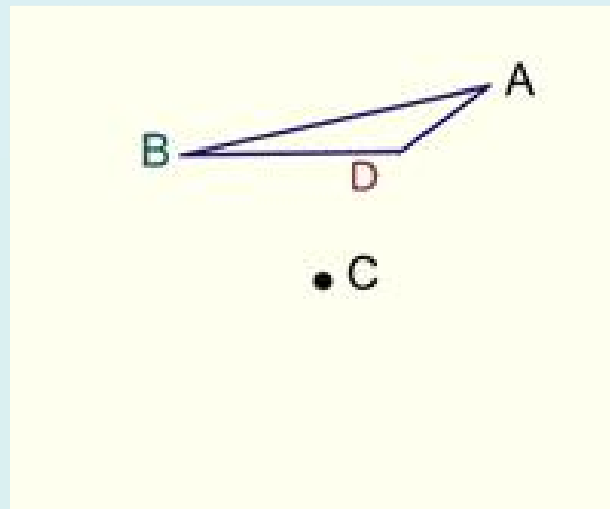
- 对称面与反映操作
- 对称轴与旋转操作
- 对称中心与反伸操作
- 旋转反伸轴与旋转加反伸操作

3.3对称中心与反伸操作

3.晶体的外部对称要素及其操作

对称中心 对称中心是一个假想的位于晶体几何中心的点，相应的操作为**反伸**。

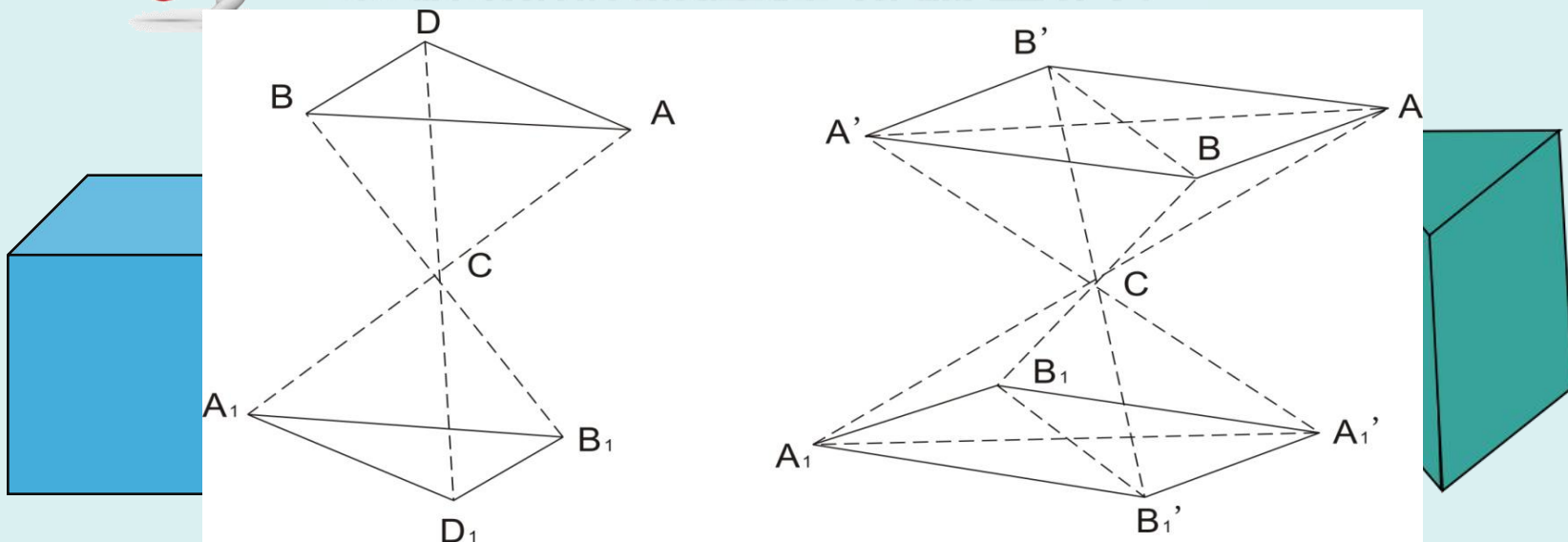
反伸



只可能在晶体中心，只可能一个。



怎样的晶体存在对称中心？



晶体上所有的晶面都两两平行，形状相同，大小相等，方向相反。

03

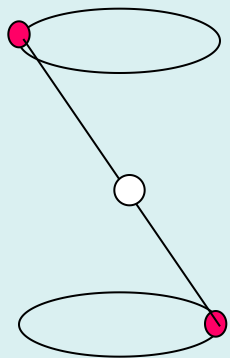
晶体的外部对称要素及其操作

- 对称面与反映操作
- 对称轴与旋转操作
- 对称中心与反伸操作
- 旋转反伸轴与旋转加反伸操作

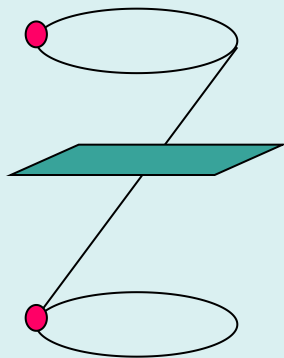
- **旋转反伸轴**为通过晶体中心的假想直线，晶体围绕该直线旋转一定角度后（此时晶体上各相等部分尚未重合），在以该直线上定点的反伸，可使晶体与未旋转之前相重合，用 L_i^n 表示。
- 操作为**旋转+反伸**的复合操作。

3.4 旋转反伸轴轴与旋转 + 反伸操作

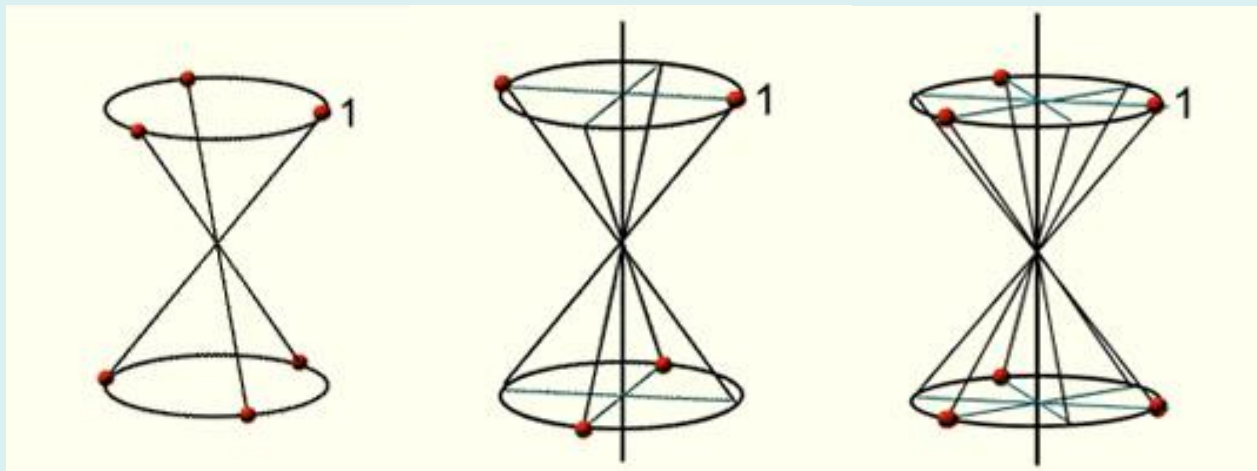
3.晶体的外部对称要素及其操作



$Li^1 = C$



$Li^2 = P$



$Li^3 = L^3C$

Li^4

$Li^6 = L^3P$

除 Li^4 外，其余各种旋转反伸轴都可以用其它简单的对称要素或它们的组合来代替

注意：

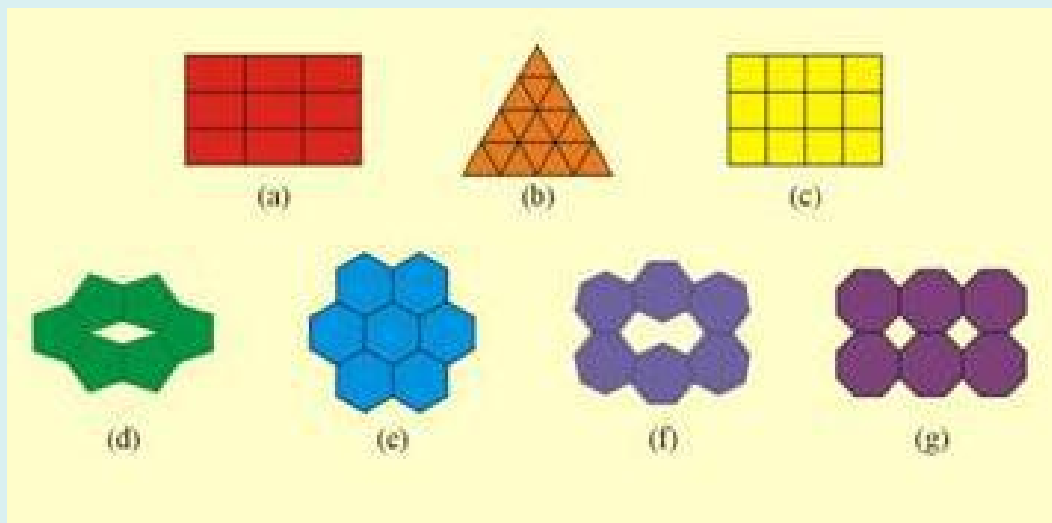
但一般我们在写晶体的对称要素时，**保留**
 $L i^4$ 和 $L i^6$ ，而其他旋转反伸轴就用简单对
称要素代替。这是因为 $L i^4$ 不能被代替， $L i^6$
在晶体对称分类中有特殊意义。

3.4 旋转反伸轴轴与旋转 + 反伸操作

3.晶体的外部对称要素及其操作

晶体的对称定律：晶体的对称轴与旋转反伸轴只有 $n = 1, 2, 3, 4, 6$ 这五种，不可能出现 $n = 5$ ，以及 $n > 6$ 的情况。

为什么呢？



04 对称型

- 概念：

对称型，也可称作点群，是晶体上全部对称要素的组合。

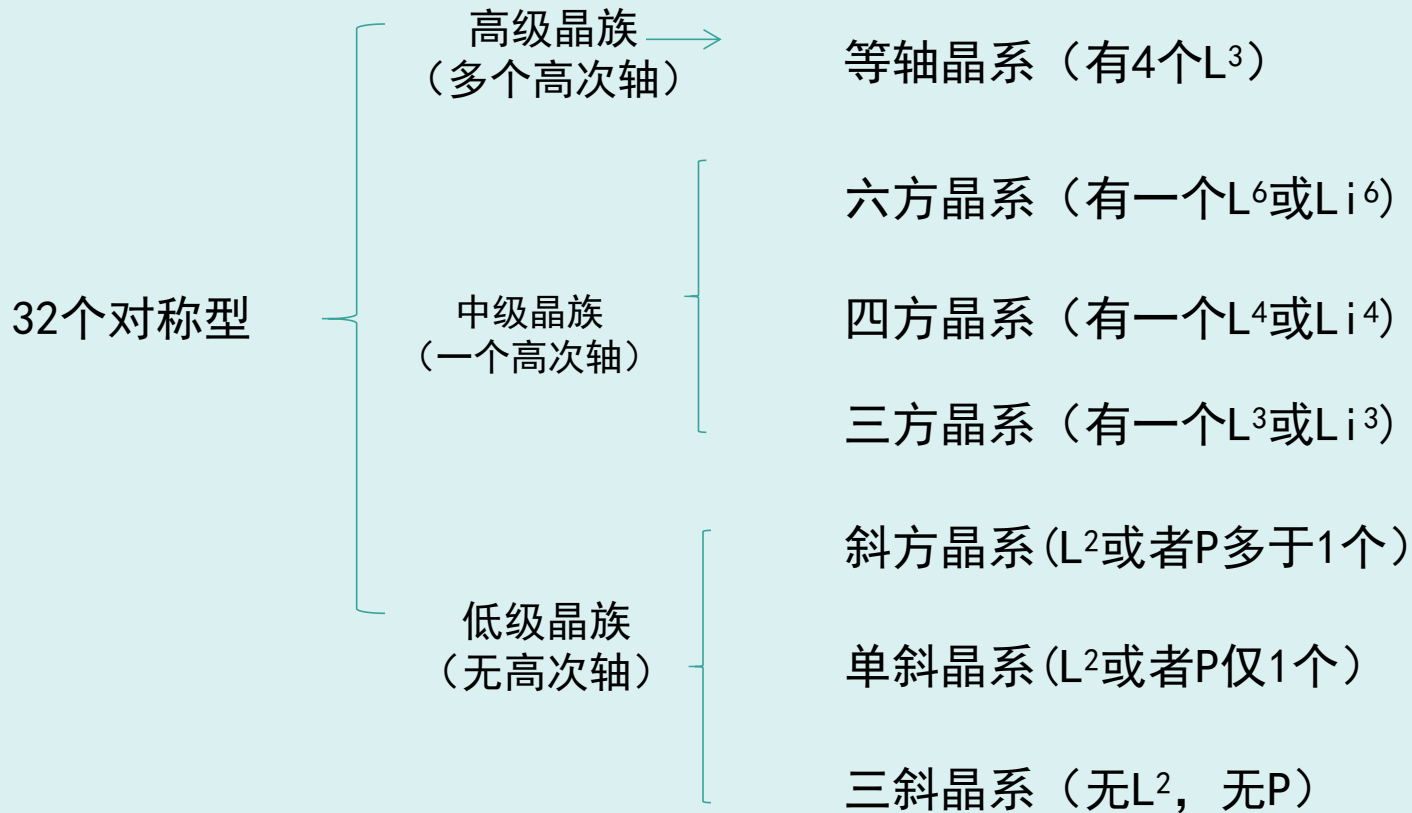
- 对称型的书写原则：

- 1) 先写对称轴和旋转反伸轴，并按照轴次由高次到低次排列
- 2) 再写对称面
- 3) 最后写对称中心。

- 晶体的对称型在数目上是有限的，根据推导，晶体的对称要素组合共有32种。

04

对称型



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	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^*	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	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. $3L^23PC$	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	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	细硫砷铅矿 白云石 α -石英 电气石 方解石
		四方晶系	唯一高次轴 L^4	14. L^4 15. L^4_1 16. L^4PC 17. L^44L^2 18. L^44P 19. $L^4_12L^22P$ 20. L^44L^25PC	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^6_1 23. L^6PC 24. L^66L^2 25. L^66P 26. $L^6_13L^23P$ 27. L^66L^27PC	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 β -石英 红锌矿 蓝锥矿 绿柱石
高级晶族	有多个高次轴	等轴晶系	必有 $4L^3$	28. $3L^24L^3$ 29. $3L^24L^33PC$ 30. $3L^44L^36L^2$ 31. $3L^4_14L^36P$ 32. $3L^44L^36L^29PC$	23 $m\bar{3}$ 43 $\bar{4}3m$ $m\bar{3}m$	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

- 1) 对称要素: P, L^n, C, L_i^n ;
- 2) 晶体的对称分类: 3个晶族, 7个晶系, 32个晶类。



思考



- ◆ 晶体的对称面最多为几个，为什么？
- ◆ 但一般我们在写晶体的对称要素时，保留

$L i^4$ 和 $L i^6$

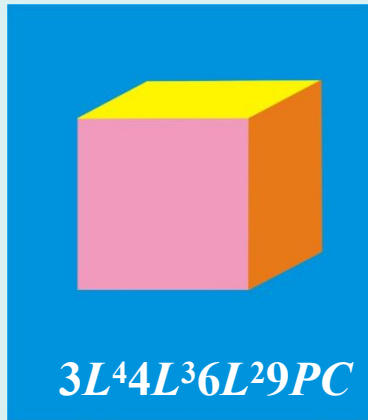
第四章 晶体定向与晶体符号

本章目录

01	晶体的定向
02	晶体定向的原则
03	各晶系晶体定向的方法
04	晶体符号



为何要进行晶体定向



- ✿ 要了解晶体的具体形态，只知道对称型是不够的
- ✿ 晶体的具体形态取决于晶体的晶面在空间的方位，亦即晶面与对称要素之间的关系

01 晶体定向

晶体定向

= {

选定坐标轴（晶轴）

+

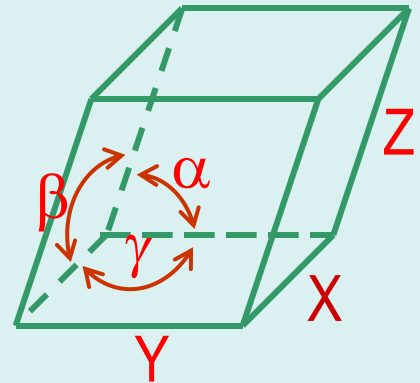
确定个轴单位长（轴单位）的比率（轴率）

}

使晶体中各种几何要素得到相应的空间取向。

01 晶体定向

晶轴 交于晶体中心的三条或四条直线，分别表示为X Y Z或X Y U Z



轴角 各晶轴之间的夹角

$$\alpha = Y \wedge Z; \beta = X \wedge Z; \gamma = X \wedge Y$$

轴率 各晶轴上的轴单位之比 $a:b:c$

$$Y \wedge Z = \alpha$$

$$X \wedge Z = \beta$$

$$X \wedge Y = \gamma$$

晶轴 \longleftrightarrow 行列，轴单位 \longleftrightarrow 结点间距

02

晶体定向的原则

A

应当符合晶体所固有的对称性

B

尽可能使

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ,$$
$$a = b = c$$

高次轴

 L^2 P 法线

显著晶棱

03

各晶系晶体定向的方法

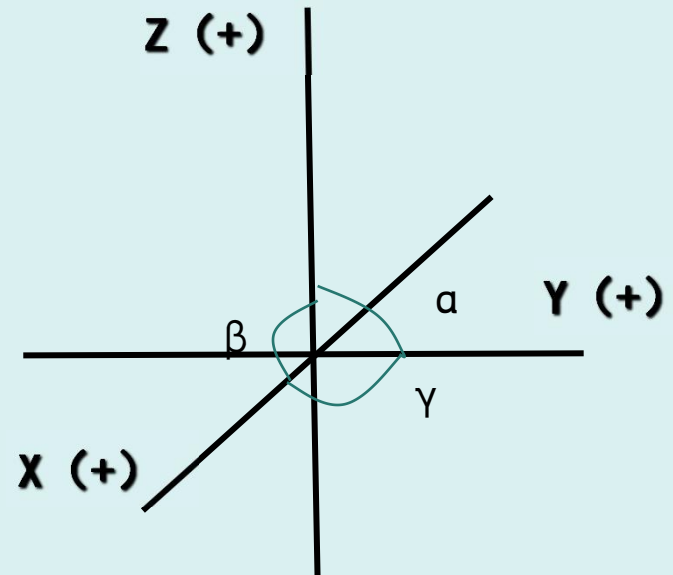
● 晶体的三轴定向

适用：等轴晶系、四方晶系、斜方晶系、单斜晶系、三斜晶系。

Z → 直立，向上为正

Y → 左右方向，向右为正

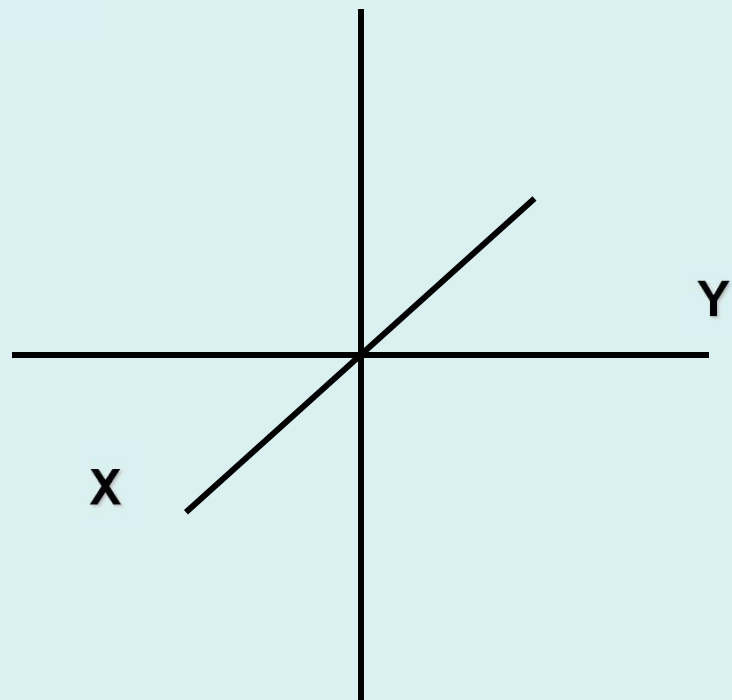
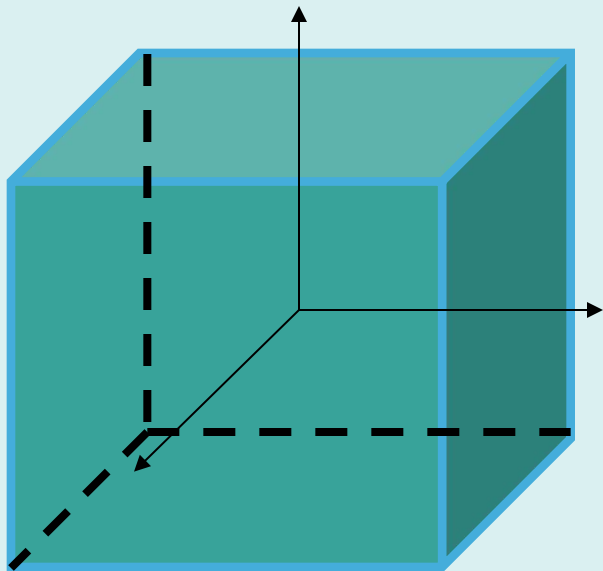
X → 前后方向，向前为正



晶体的三轴定向

Z

3. 各晶系晶体定向的方法



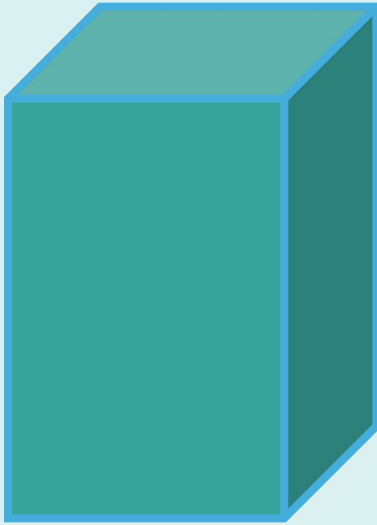
$3L^4/3L^2/3L_i^4 \rightarrow X \ Y \ Z$ 轴

等轴晶系 $a=b=c$

$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

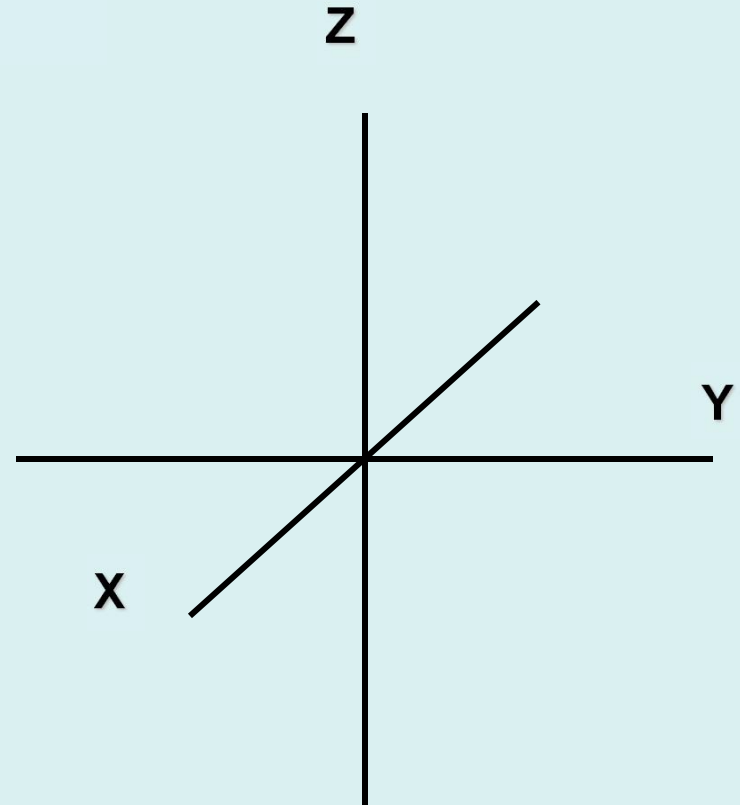
晶体的三轴定向

3. 各晶系晶体定向的方法



$1L^4 \rightarrow Z$ 轴

$2L^2_{\perp} / 2P_{\perp} / 2$ 晶棱 $_{\perp} \rightarrow X Y$ 轴

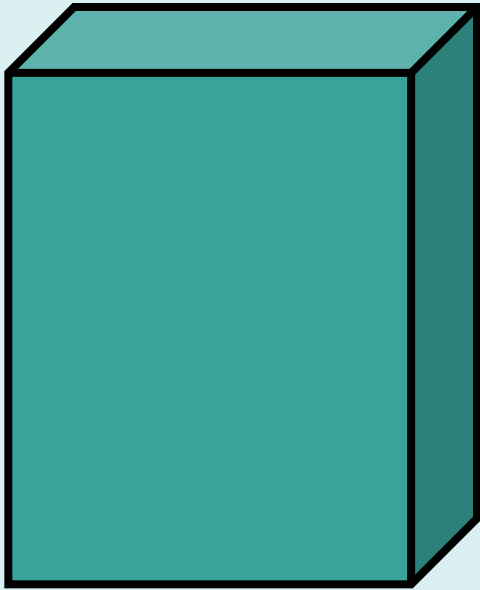


四方晶系 $a=b \neq c$

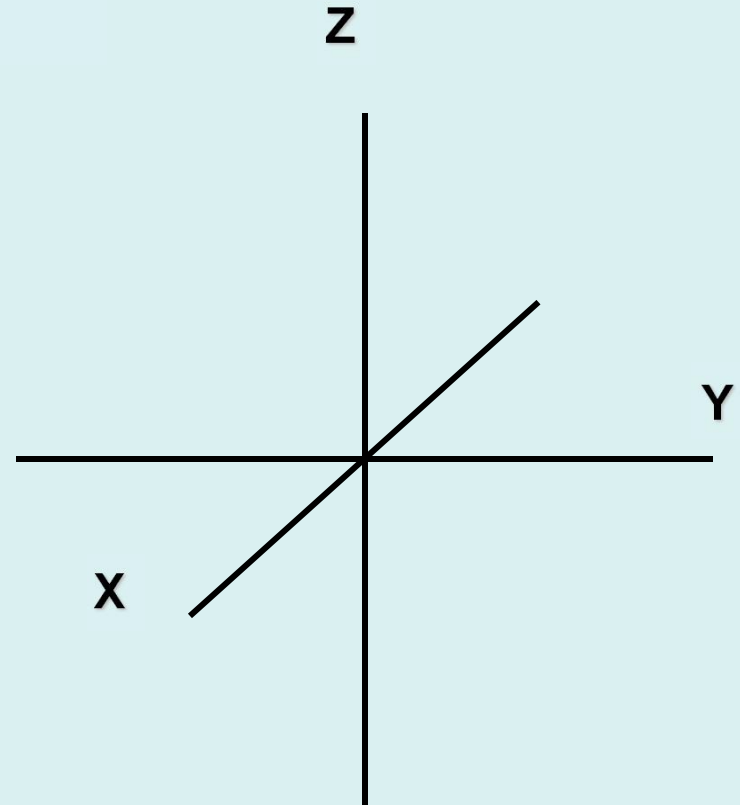
$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

晶体的三轴定向

3. 各晶系晶体定向的方法



$3L^2/3P \rightarrow X Y Z$ 轴

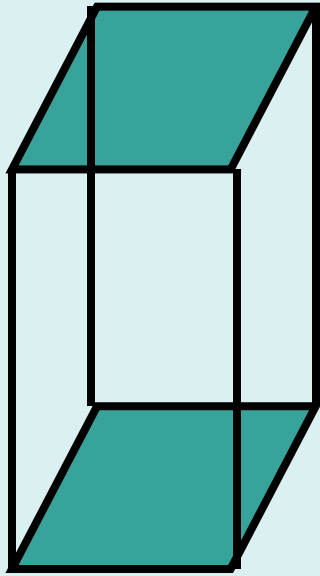


四方晶系 $a=b \neq c$

$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

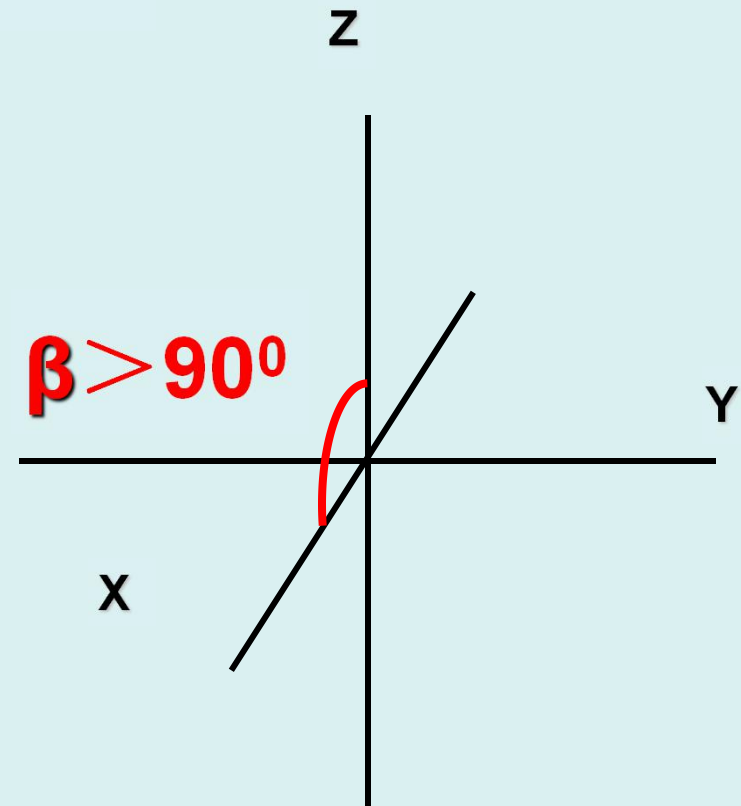
晶体的三轴定向

3. 各晶系晶体定向的方法



1 $L^2/1P$ 法线 \rightarrow Y轴,

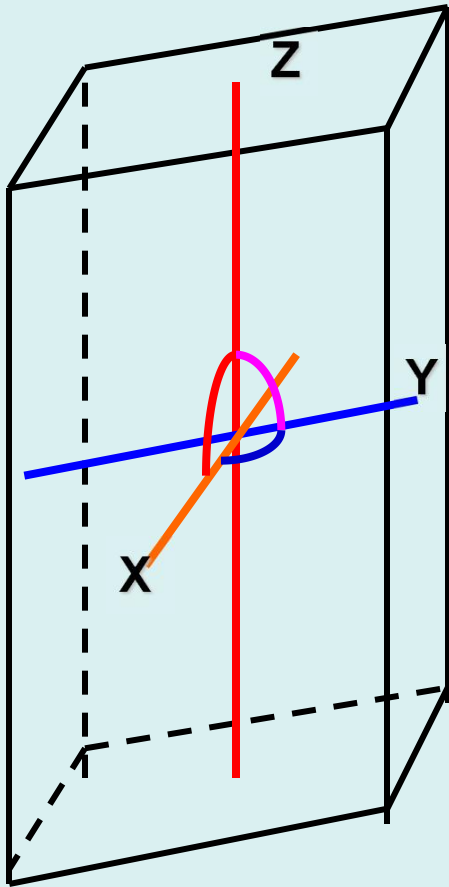
2 晶棱 \rightarrow X Z轴



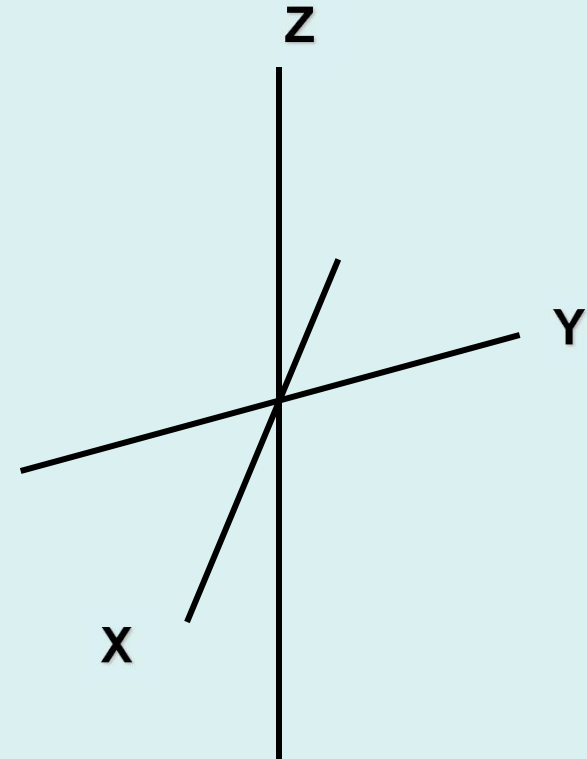
单斜晶系 $a \neq b \neq c$

$\alpha = \gamma = 90^\circ \quad \beta \neq 90^\circ$

3. 各晶系晶体定向的方法



选择3个显著的、而且相互间接近于 90° 的晶棱方向作为X Y Z轴



三斜晶系 $a \neq b \neq c$

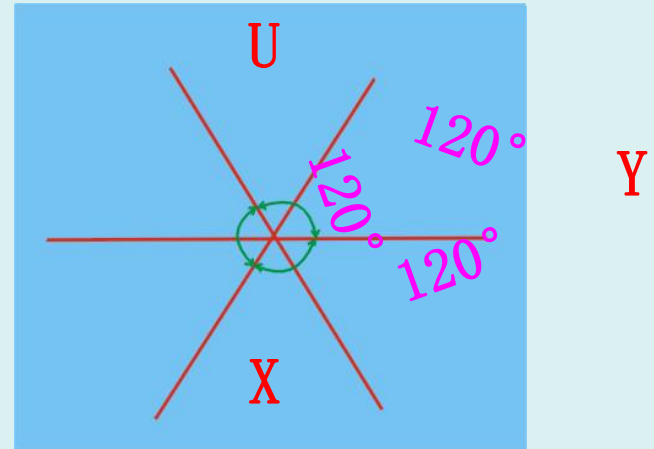
$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

03

各晶系晶体定向的方法

晶体的四轴定向

适用于**三方、六方**晶系。

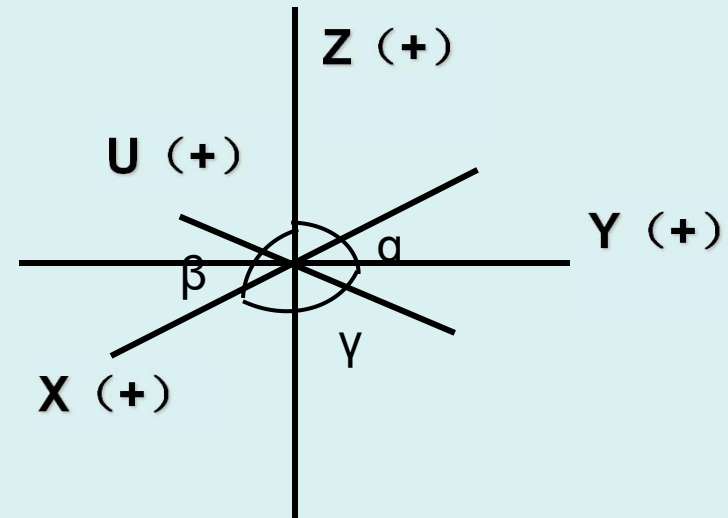


Z→ 直立，向上为正

Y→ 左右方向，向右为正

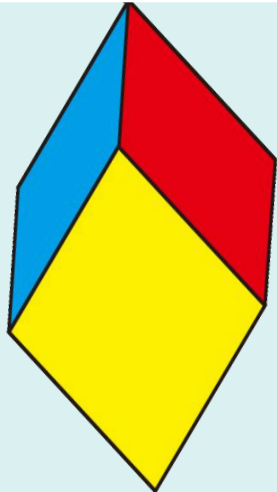
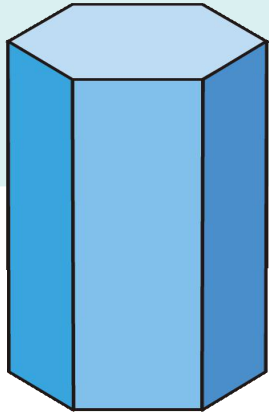
X → 左前一右后方向，前为正

U→ 右前-左后方向，后为正



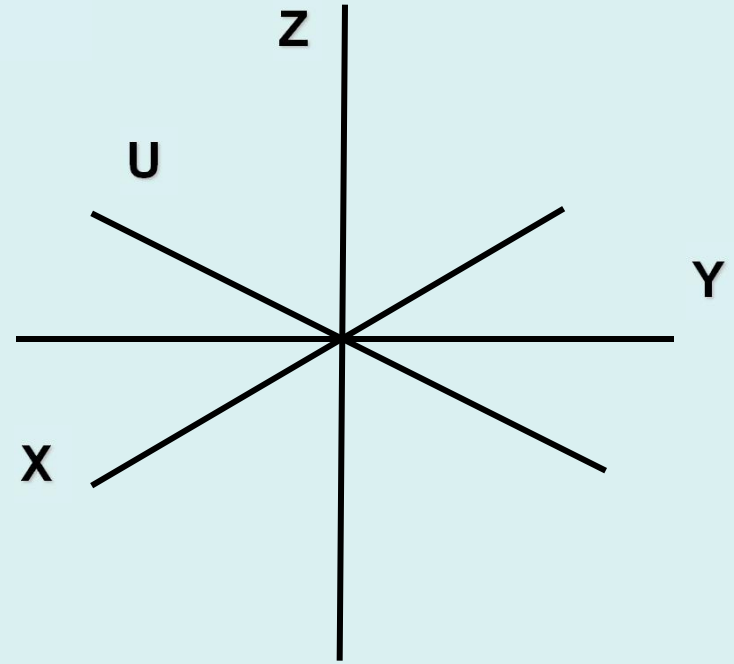
晶体的四轴定向

3. 各晶系晶体定向的方法



$L^3/L^6 \rightarrow Z$ 轴

$3L^2 / 3P / 3$ 晶棱 (120° 夹角) $\rightarrow X Y U$ 轴



三方、六方晶系 $a=b \neq c$;
 $\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$

定向原则表

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 ⁴ 4L ³ 6L ² 3L ⁴ 4L ³ 6L ² 9PC	三个互相垂直的L ⁴ 分别为x、y、z轴		x轴前后水平, y轴左右水平, z轴直立。 a=b=c $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
		3L _i ⁴ 4L ³ 6P	三个互相垂直的L _i ⁴ 分别为x、y、z轴			
		3L ² 4L ³ 3L ² 4L ³ 3PC	三个互相垂直的L ² 分别为x、y、z轴			
中级晶族	四方晶系	L ⁴ 4L ² 、L _i ⁴ 2L ² 2P L ⁴ 4L ² 5PC	两个互相垂直的L ² 分别为x轴和y轴		z轴直立 y轴左右水平	
		L ⁴ 4P	两个相互垂直的P的法线分别为x轴和y轴			
		L ⁴ L _i ⁴ L ⁴ PC	两个均垂直于z轴且本身间也相互垂直的适当晶棱方向分别为x轴和y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	唯一高次轴为直立的z轴	三个互成60°交角的L ² 分别为x轴、y轴和u轴		x轴水平朝正前偏左30°, u轴水平朝正后偏左30°。 a=b≠c $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$
		L ⁶ 6P L _i ⁶ 3L ² 3P L ³ 3P		三个互成60°交角的P的法线分别为x轴、y轴和u轴		
		L ⁶ 、L _i ⁶ 、L ⁶ PC L ³ 、L ³ C		三个均垂直于z轴且本身间互成60°交角的适当晶棱方向分别为x轴、y轴和u轴		
低级晶族	斜方晶系	3L ² 、3L ² 3PC	三个互相垂直的L ² 分别为z轴、y轴和x轴		z轴直立	
		L ² 2P	L ² 为z轴，二个互相垂直的P的法线分别为y轴和x轴			
	单斜晶系	L ² 、L ² PC	L ² 为y轴	两个均垂直于y轴的适当晶棱方向分别为z轴和x轴		y轴左右水平, x轴前后、朝前下方倾。 a≠b≠c $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta > 90^\circ$
		P	P的法线为y轴			
	三斜晶系	L、C		三个适当的晶棱方向为z轴、y轴和x轴		y轴左右、朝右下方倾, x轴大致前后、朝前下方倾。 a≠b≠c $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ $\alpha > 90^\circ$ 、 $> 90^\circ$ $\beta > 90^\circ$

04

晶体符号

- 晶面符号
- 晶棱符号
- 晶带轴和晶带定律

4.1晶面符号

4. 晶体符号

✓ 晶面符号的概念

晶体定向后，晶面在空间的相对位置就可以根据它与晶轴的关系来确定，表示晶面空间方位的符号就叫晶面符号。

常用的是**米氏符号**：晶面在三根晶轴上的截距系数的倒数比，用小括号括起来。

✓ 晶面符号的构成

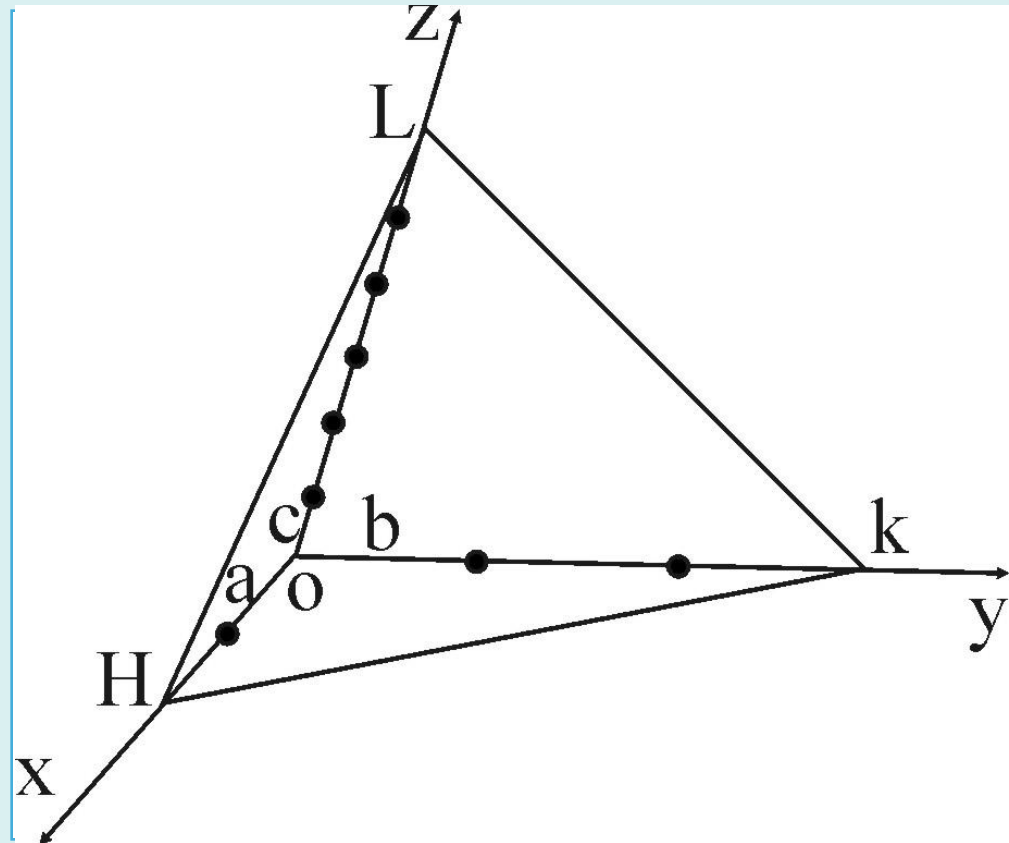
一般表达形式为 (hkl) 或 $(hk\bar{l})$ ， h 、 k 、 l 叫晶面指数。

4.1 晶面符号

4. 晶体符号

举例：

设某晶面在X, Y, Z 轴上的截距为 $2a$, $3b$, $6c$, 那么截距系数为2, 3, 6, 倒数为 $1/2$, $1/3$, $1/6$, 化简以后的倒数比为3:2:1, 写做(321), 这就是该晶面的米氏符号。



注意：三个晶轴上的轴单位不一定相等，所以，截距系数与截距不一定成正比。

4.1晶面符号

4. 晶体符号

但对于三方，六方晶系来说，可以用四轴定向，要用四个晶面指数 h 、 k 、 \bar{i} 、 l ，晶面符号为 $(hk\bar{i}l)$ ，排列顺序为X、Y、U、Z，前面三个指数的代数和等于0。例如：
 $(11\bar{2}0)$ $(10\bar{1}1)$ 等。

4.1晶面符号

4. 晶体符号

★ 晶面符号中**指数为零**时，表明该晶面与相应的结晶轴**平行**

★ 在同一晶体上，如果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**



★ 晶面指数越大，在晶轴上的截距越**小**

★ 如果晶面相交于晶轴的**负端**，则在该相应指数上加“**-**”

4.2 晶棱符号

4. 晶体符号

✓ 晶棱符号的概念

晶体被定向后，晶棱在空间的相对方位被确定，用简单阿拉伯数字表示**晶棱在空间方位分布特征的符号**被称为晶棱指数。

晶棱指数常用米氏符号形式表示。

✓ 晶棱符号的构成

晶棱符号采用方括号表示“[]”，写作： $[rst]$

4.2 晶棱符号

4. 晶体符号

✓ 三轴定向晶体晶棱指数的确定

确定晶棱符号的方法是：将晶棱（或其他直线）**平移**至经过晶体中心（即坐标原点），然后在直线上任取一点，**求出该点在三轴上的坐标**（ x 、 y 、 z ），以轴长来度量，即可求得晶棱符号

$$\frac{X}{a} : \frac{Y}{b} : \frac{Z}{c} = r : s : t$$

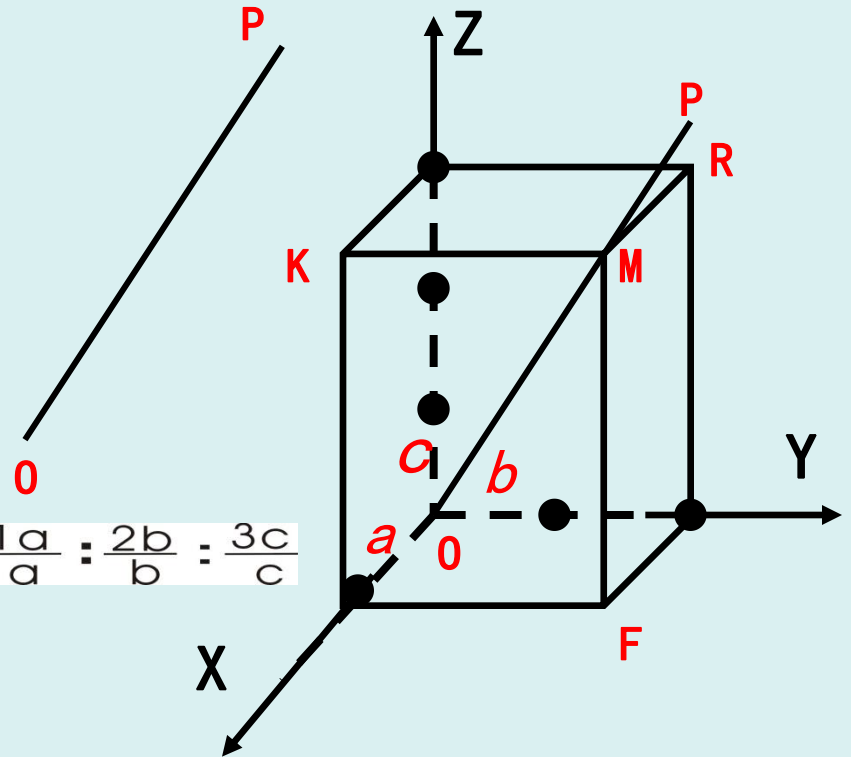
举例：

设有一晶棱OP，将其平移，使其通过晶轴交点，并在其上任取一点M，M点在三个晶轴上的坐标分别为MR、MK、MF，三个轴的轴长分别为a、b、c。

则 $r : s : t = \frac{MR}{a} : \frac{MK}{b} : \frac{MF}{c} = \frac{1a}{a} : \frac{2b}{b} : \frac{3c}{c}$

= 1 : 2 : 3

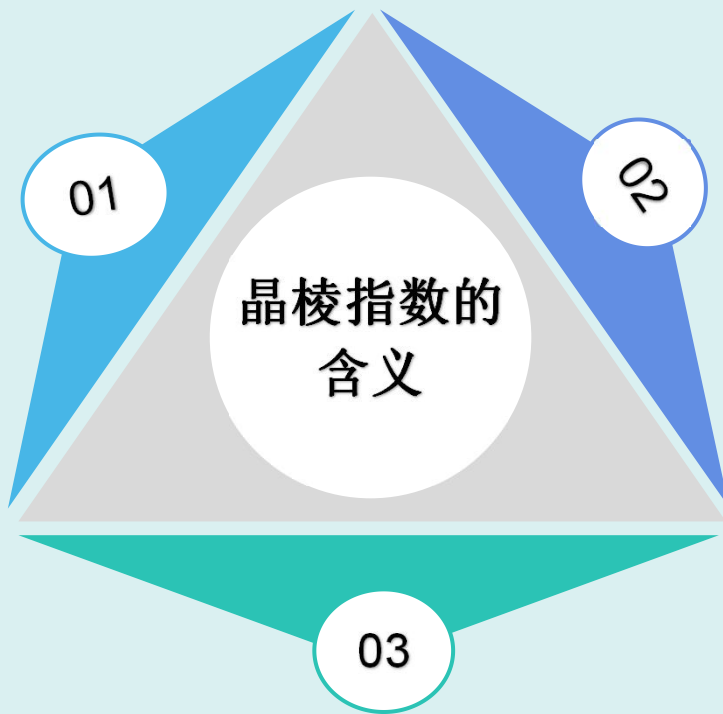
则 故该晶棱的符号为 [123] .



4.2 晶棱符号

4. 晶体符号

晶棱指数中，若**符号为负**，则表示晶棱垂足对应晶轴的**负端**



绝对值相同，而符号相反的两个晶棱为**同一晶棱**

若某一晶棱**垂足的截距系数值越大**，相应的**晶棱指数值则越大**。

本章重点总结

- 1) 晶体定向：晶轴的选择，坐标系的建立。
- 2) 各个晶系的定向方法与晶体参数。
- 3) 在晶体定向的基础上，确定晶面符号，一定要学会在宏观形态上确定各晶面的晶面符号。



第五章 单形和聚形

本章目录

一

单形

二

单形的划分

三

聚形

01 单形

- 单形的概念
- 单形的符号
- 单形指数的确定原则
- 单形的推导

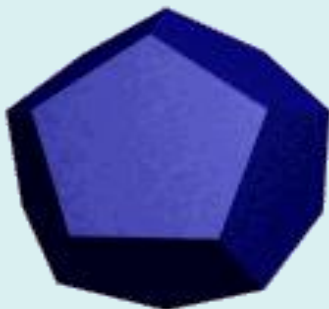
1.1单形的概念

1.单形

由晶体中所有宏观对称要素（对称型）联系起来的一组晶面的总合。

单形是一个晶体上能够由该晶体的所有对称要素操作而使它们相互**重复**的一组晶面。

在理想的情况下，同一单形内的晶面应该**同形等大**。例如：立方体、八面体、四面体、五角十二面体、菱形十二面体和四角三八面体都是单形。



1.2单形的符号

1.单形

单形的符号简称形号，它是指单形中选择一个代表面，把该晶面的指数用“{ }”括起来，用来表征该单形的一组晶面的结晶学取向的符号。

1.3单形指数的确定原则

1.单形

对于立方体:

(100) 、 (010) 、 (001) 、 $(\bar{1}00)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 、 $(00\bar{1})$



1.3单形指数的确定原则

1.单形



1.4单形的推导

1.单形

一个原始晶面

对称型+对称操作

单形



定向后，原始晶面可能的位置7个

平行于X、Y轴，垂直于Z轴

平行于X、Z轴，垂直于Y轴

平行于Y、Z轴，垂直于X轴

平行于Y轴，相交于X、Z轴

平行于X轴，相交于Y、Z轴

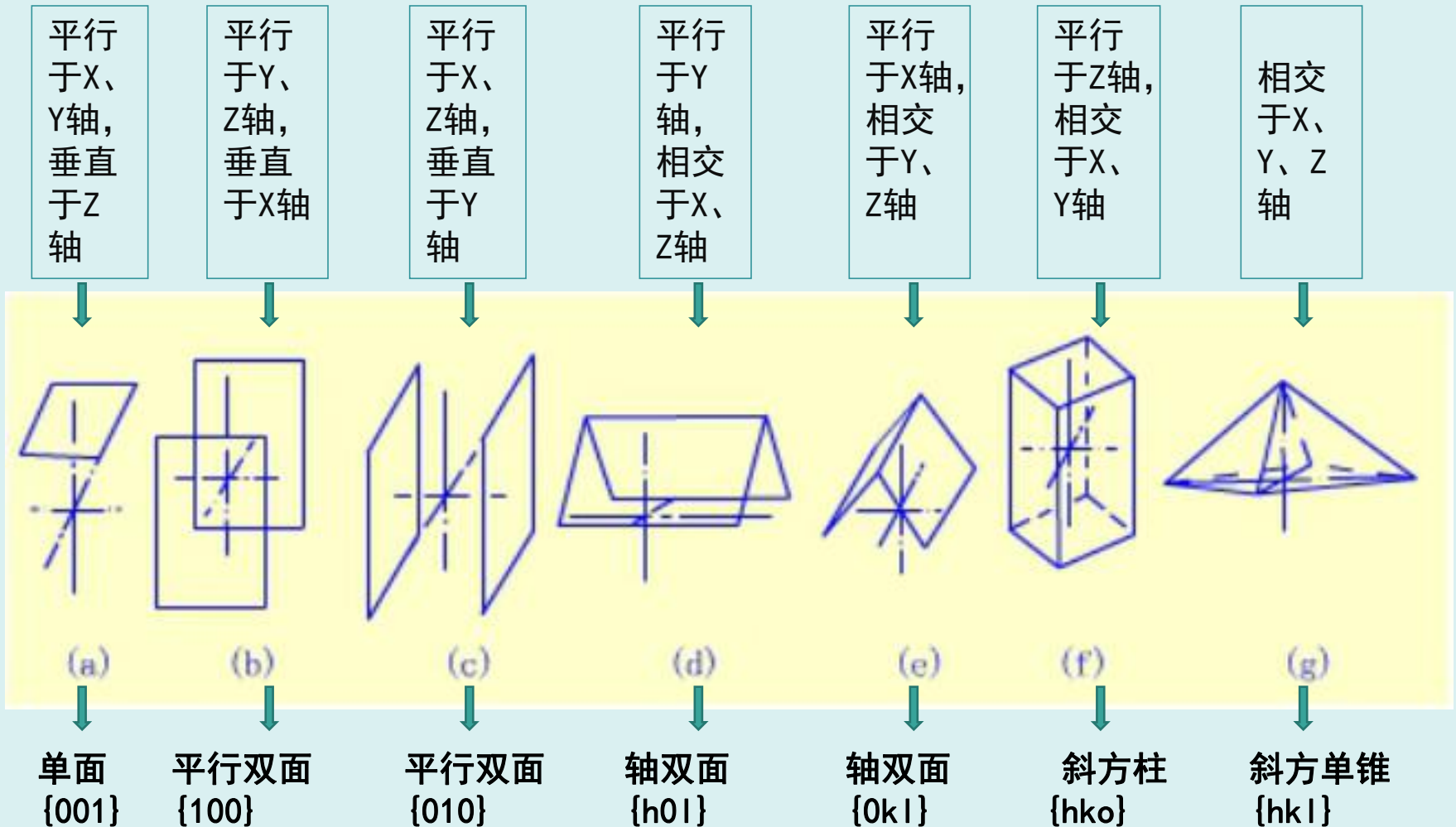
平行于Z轴，相交于X、Y轴

相交于X、Y、Z轴

1.4单形的推导

1.单形

举例：以对称型 L^2P 为例



3.单形的推导

1.单形

32种对称型 × 7个原始位置 = 224种单形

形态
+ 对称性

结晶
单形
(146种)

形态

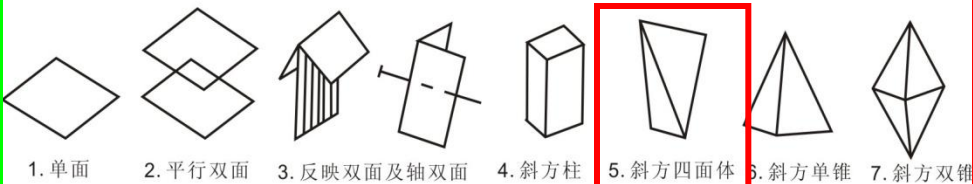
几何
单形
(47种)

立方体
{100}

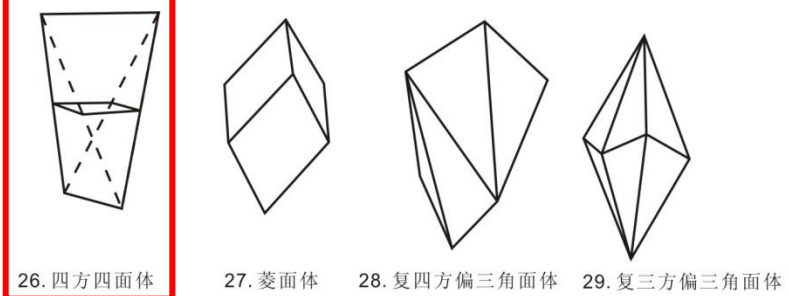
在等轴晶系的五个对称型中均有，它有5个结晶单形，而只有1个几何单形

I. 低级晶族的单形

7个



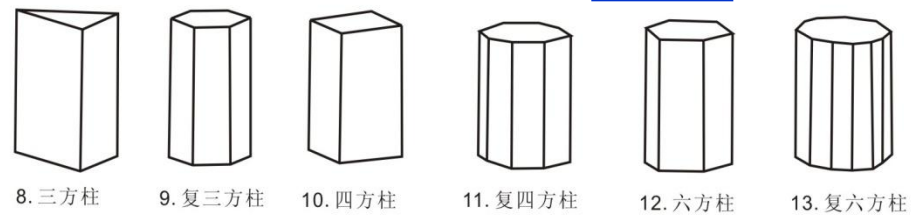
1. 单面 2. 平行双面 3. 反映双面及轴双面 4. 斜方柱 5. 斜方四面体 6. 斜方单锥 7. 斜方双锥



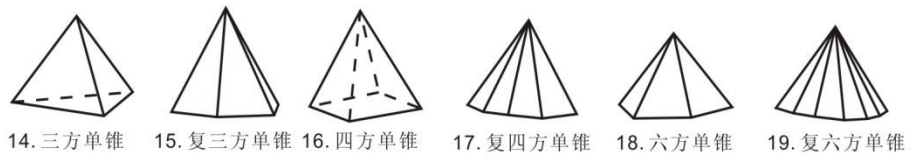
26. 四方四面体 27. 菱面体 28. 复四方偏三角面体 29. 复三方偏三角面体

II. 中级晶族的单形

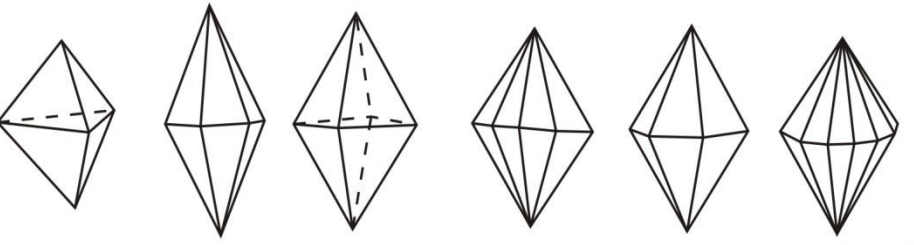
25个



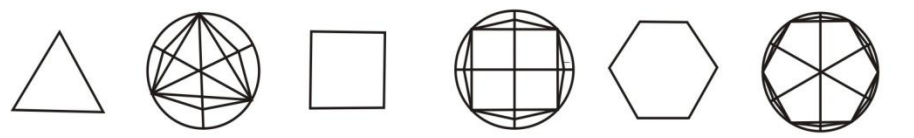
8. 三方柱 9. 复三方柱 10. 四方柱 11. 复四方柱 12. 六方柱 13. 复六方柱



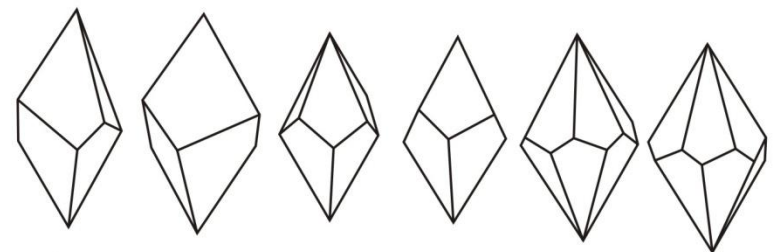
14. 三方单锥 15. 复三方单锥 16. 四方单锥 17. 复四方单锥 18. 六方单锥 19. 复六方单锥



20. 三方双锥 21. 复三方双锥 22. 四方双锥 23. 复四方双锥 24. 六方双锥 25. 复六方双锥



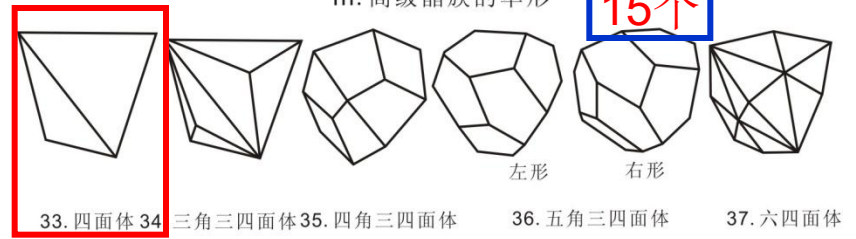
各种柱锥的横切面



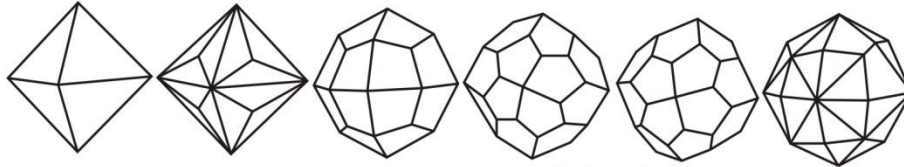
左形 右形 30. 三方偏方面体 左形 右形 31. 四方偏方面体 左形 右形 32. 六方偏方面体

III. 高级晶族的单形

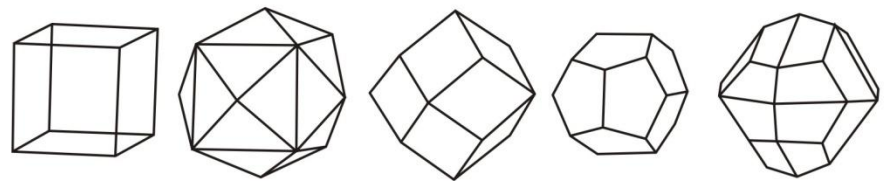
15个



33. 四面体 34. 三角三八面体 35. 四角三八面体 36. 五角三八面体 37. 六四面体

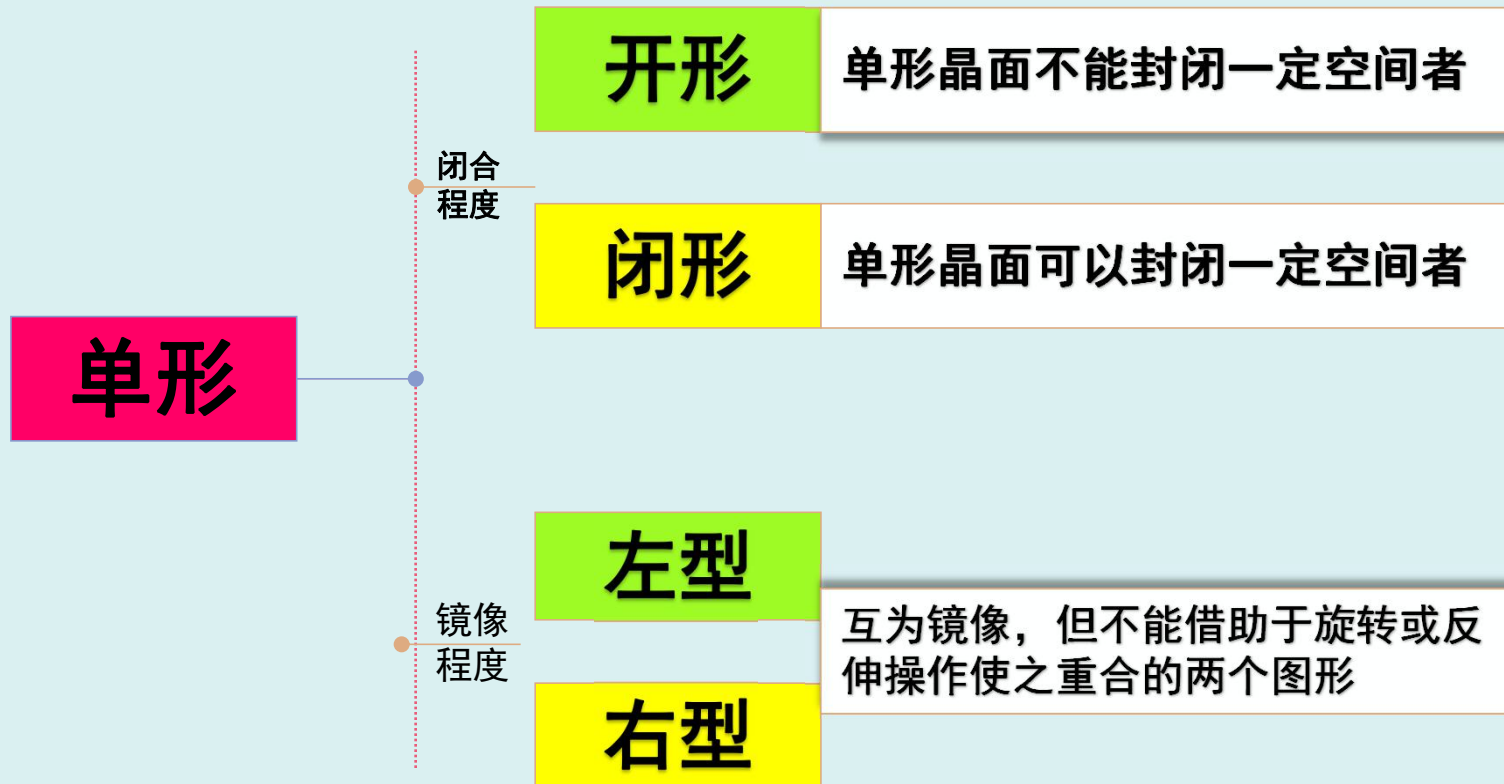


38. 八面体 39. 三角三八面体 40. 四角三八面体 左形 右形 41. 五角三八面体 42. 六八面体

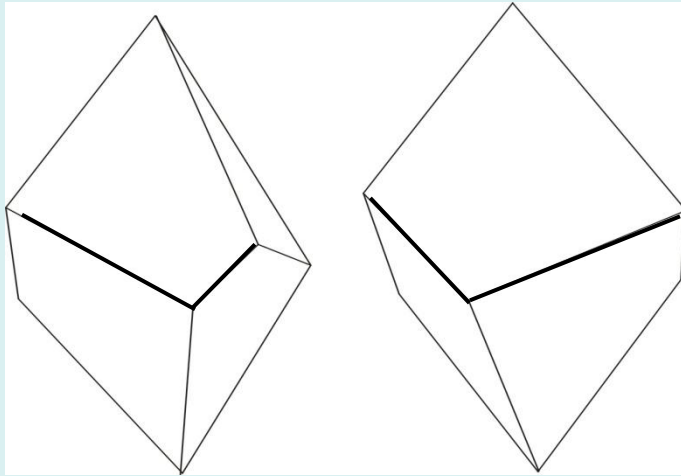


43. 立方体 44. 四六面体 45. 菱形十二面体 46. 五角十二面体 47. 偏方复十二面体

02 单形的划分



02 单形的划分



上部晶面不等长的边，长边在右为右形，长边在左为左形

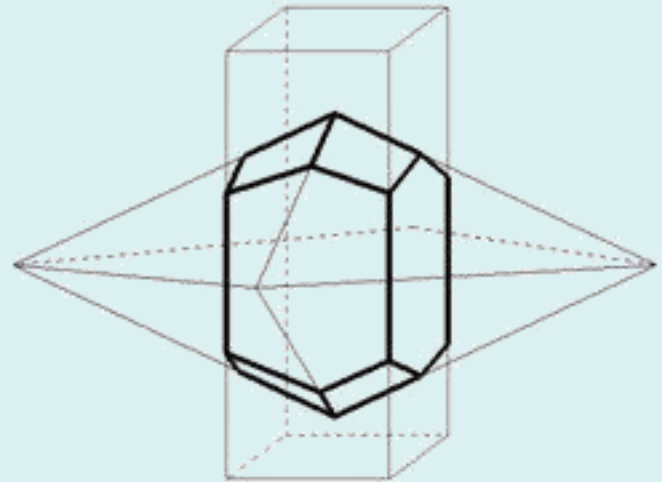
对于偏方面体

03

聚形

• 1. 定义

两个以上单形的聚合称为聚形。是由两个以上单形共同圈闭一定的空间。



03 聚形

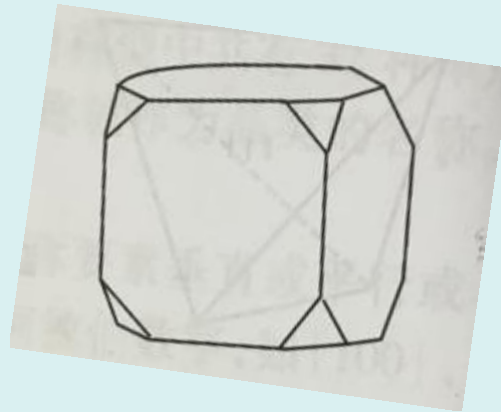
注意事项：

1. 单形相聚的个数等于聚形上晶面的种数；
2. 不能用晶面的形状来判断聚形中单形的名称；
3. 单形相聚不是任意的，必须是属于同一对称型的单形才能相聚； → 单形相聚的原则
4. 由于每种对称型所能推导出的单形最多不能超过7种，所以聚形中的单形也是有限的。

03 聚形

注意

注意：单形的晶面在聚形里可以变得面目全非，例如：立方体晶面不一定是正方形，八面体的晶面不一定是三角形等等。



立方体与八面体相聚图

本章重点

- 1.单形的定义以及表示方法；
- 2.单形的推导方法。



思考



- ◆ 八面体的单形符号是什么？
- ◆ 同一晶体中能否出现两个名称相同的单形？
- ◆ 三方柱与四方柱能否相聚？为什么？

第六章 晶体的规则连生

目录

1

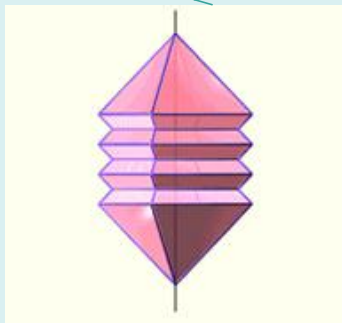
平行连生

2

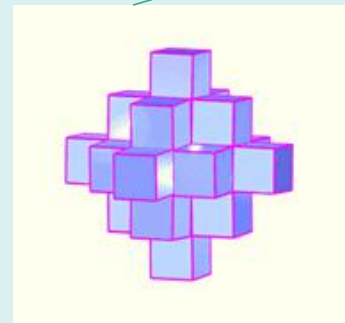
双晶

01 平行连生

同种晶体，彼此平行地连生在一起，连生着的每一个晶体的相对应的晶面和晶棱都彼此平行。



明矾八面体晶体的平行连晶



萤石立方体晶体的平行连生

特点

- ✓ 不同单体之间所有的结晶方向(包括各个对应的结晶轴、对称要素、晶面及晶棱的方向)都一一对应、相互平行。
- ✓ 各单体间的格子构造是连续的，它们实际上是外形上象多晶体的单晶体。

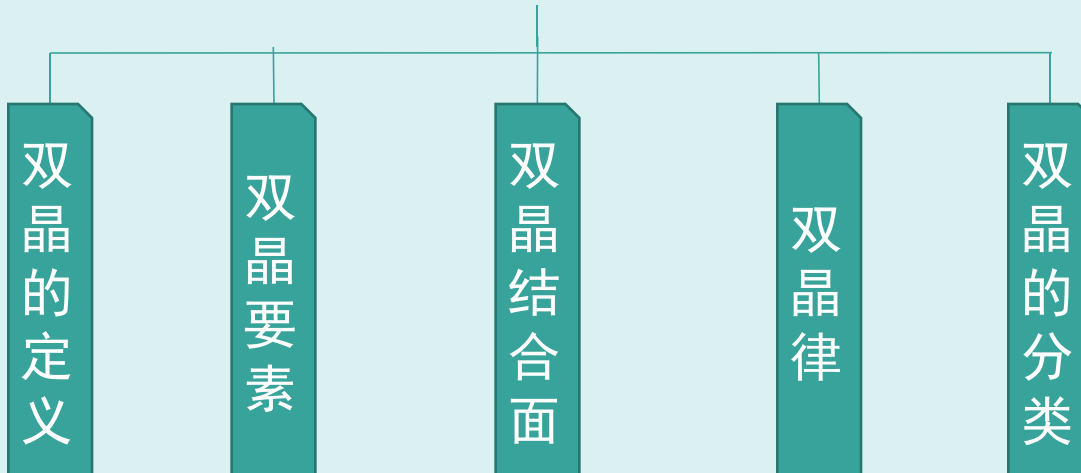




02

双晶

双晶

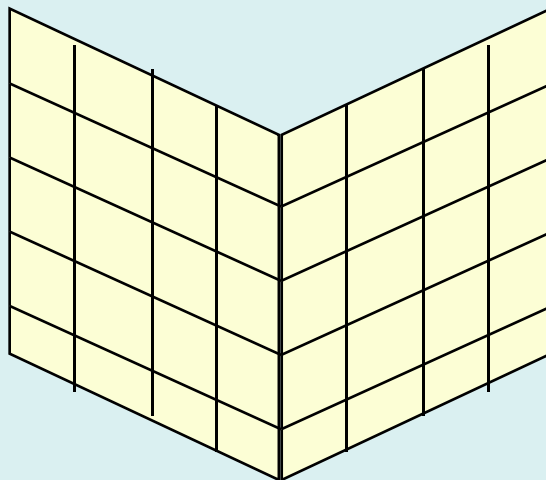


1.1双晶的定义

1.双晶

双晶也叫孪晶，是两个以上的**同种晶体**按一定的对称规律形成的规则连生。

相邻两个个体的相对应的面、棱、角并非完全平行，但它们可以借着对称要素（旋转、反映、反伸），使两个个体彼此重合或平行。



双晶区别于平行连晶的根本不同之处是：

构成双晶的两单体的格子构造是互不平行连续的。

2.2双晶要素

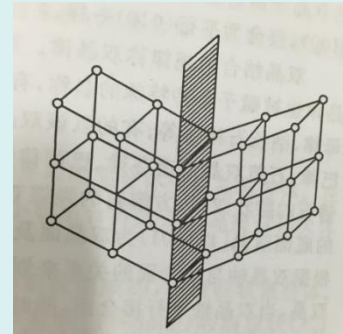
2.双晶

双晶要素

双晶中相邻单体之间 存在的对称要素

A

双晶面



为一假想的平面，通过它的反映，可使双晶相邻的两个个体重合或平行。

B

双晶轴



为一假想直线，双晶中一单体围绕它旋转一定角度后，可与另一单体重合、平行或连成一个完整的晶体

C

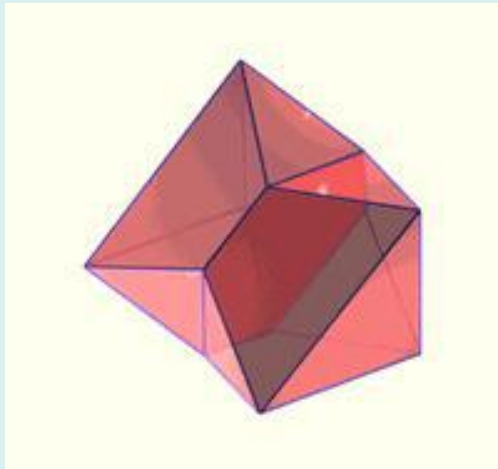
双晶中心

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、平行或拼接成一个完整晶体。

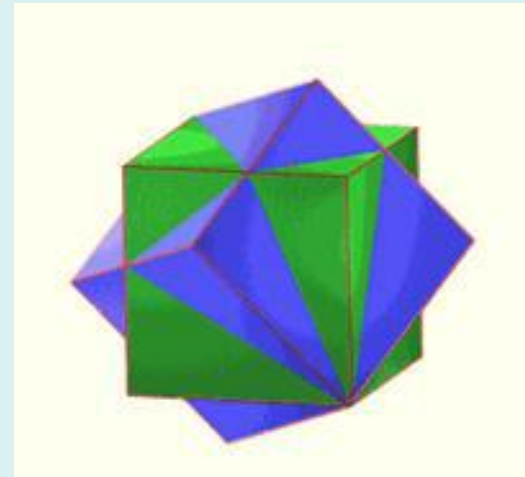
2.3双晶接合面

2.双晶

两单体之间的接触面，属于两个个体之间的共用面网。可以是平面，也可以是不规则曲面，并形成**缝合线**。



尖晶石平直双晶接合面



萤石双晶不规则接合面

双晶接合面可与双晶面重合（石膏），也可不重合（正长石）。

2.4 双晶律

2.双晶

描述单体构成双晶的具体规律叫双晶律。

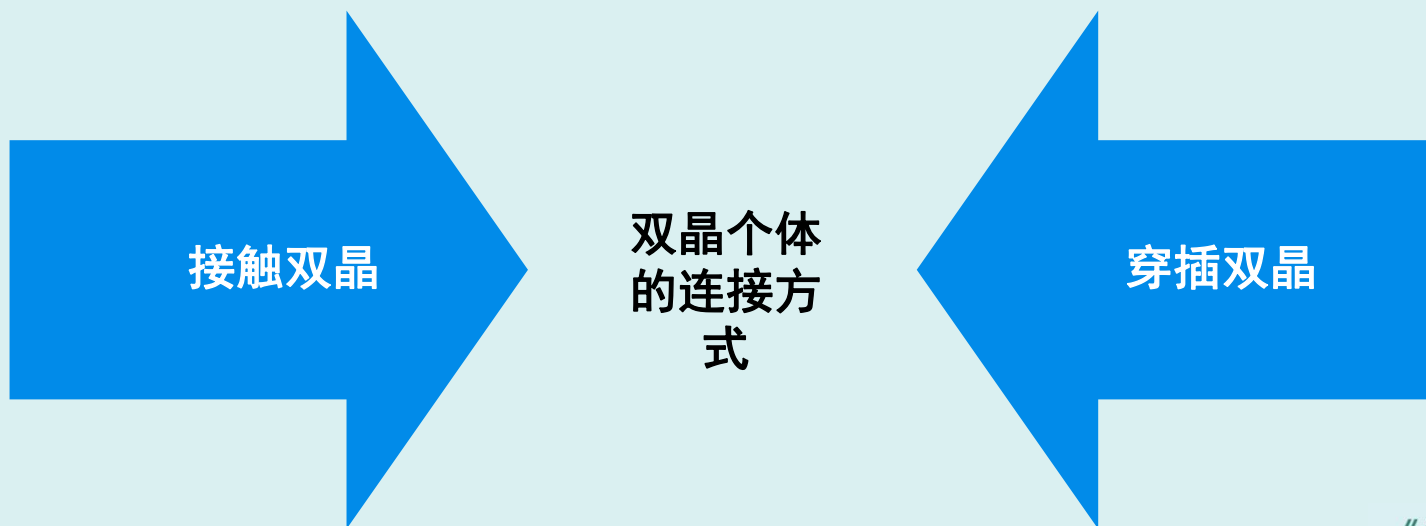
长石中常见的双晶律

双晶律	双晶轴	接合面	接合方式及出现范围
钠长石律	$\perp(010)$	(010)	通常为聚片双晶，仅见于三斜晶系长石中
曼尼巴律	$\perp(001)$	(001)	简单的接触双晶
巴温诺律	$\perp(021)$	(021)	简单的接触双晶，亦可呈四连晶，斜长石中少见
卡斯巴律	c轴	一般为(010)	简单的接触或贯穿双晶
肖钠长石律	b轴	平行b轴的 菱形切面	聚片双晶，仅见于三斜晶系的长石中
钠长石-卡斯巴律	$\parallel(010)$ 且 $\perp(001)$	(010)	聚片双晶，仅见于斜长石中

2.5双晶的类型

2.双晶

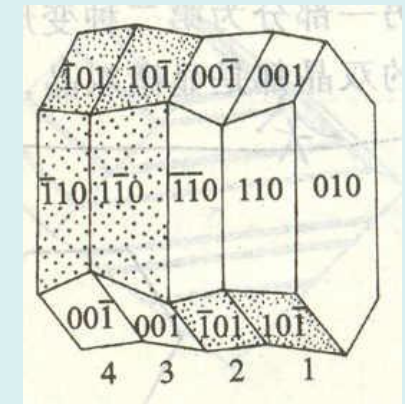
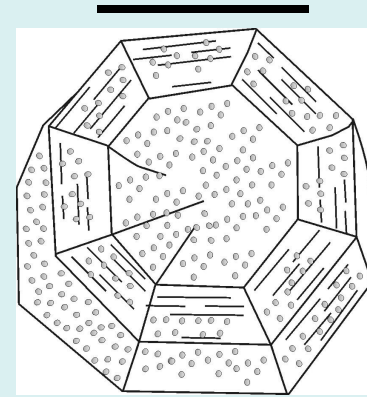
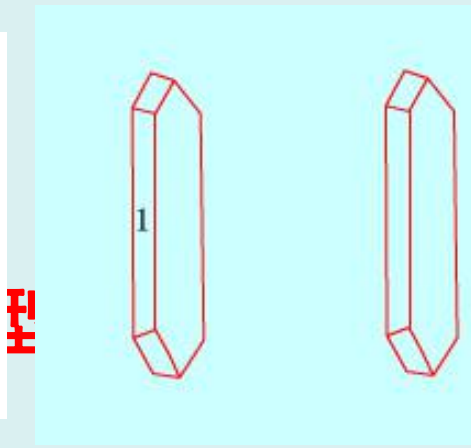
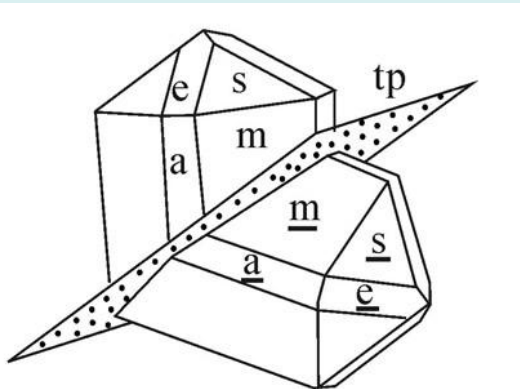
根据双晶个体的连接方式，可将双晶划分为接触双晶和穿插双晶两种类型。



2.5双晶的类型

2.双晶

(1) 接触双晶: a. 简单接触双晶、 b. 聚片双晶、 c. 环状双晶、 d. 复合双晶。



a. 两个单体以一个明显而规则的接合面相接触。

b. 由若干单体按同一种双晶律所组成，表现为一系列接触双晶的聚合，所有接合面均相互平行

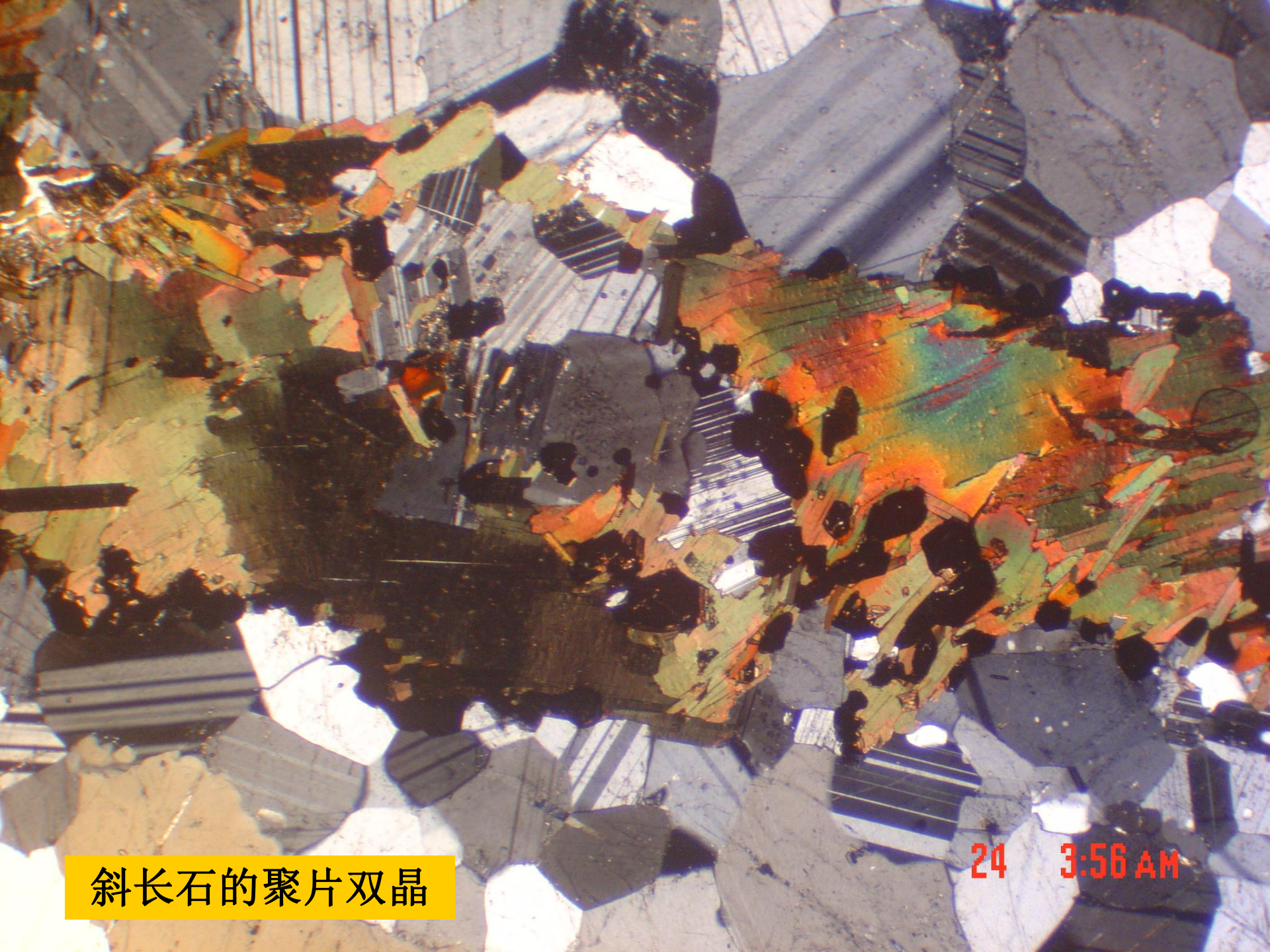
c. 多个单体以相同的双晶律、不平行的结合面形成。

d. 不同的双晶律结合在一起而成。









斜长石的聚片双晶

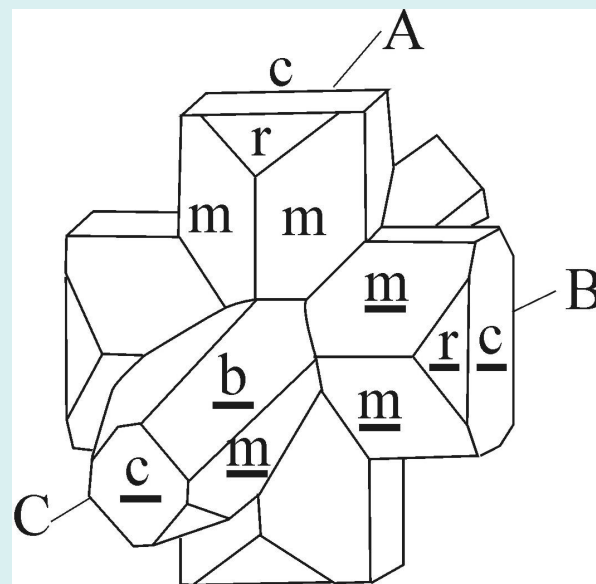
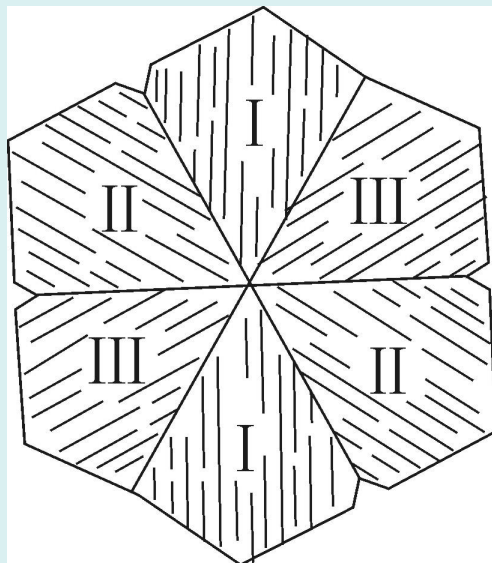
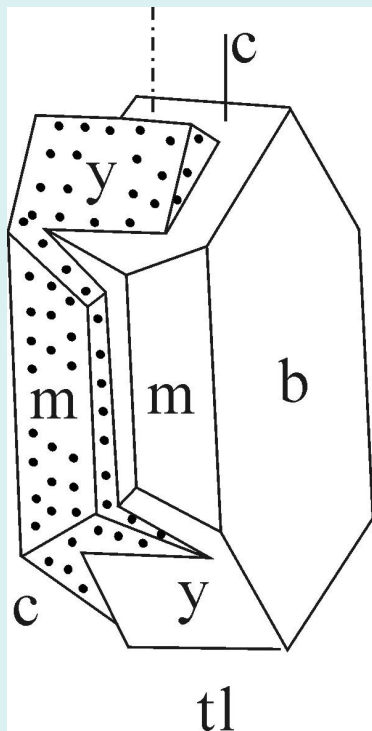
24 3:56 AM

2.5双晶的类型

2. 双晶

(2) 穿插双晶（贯穿双晶）：

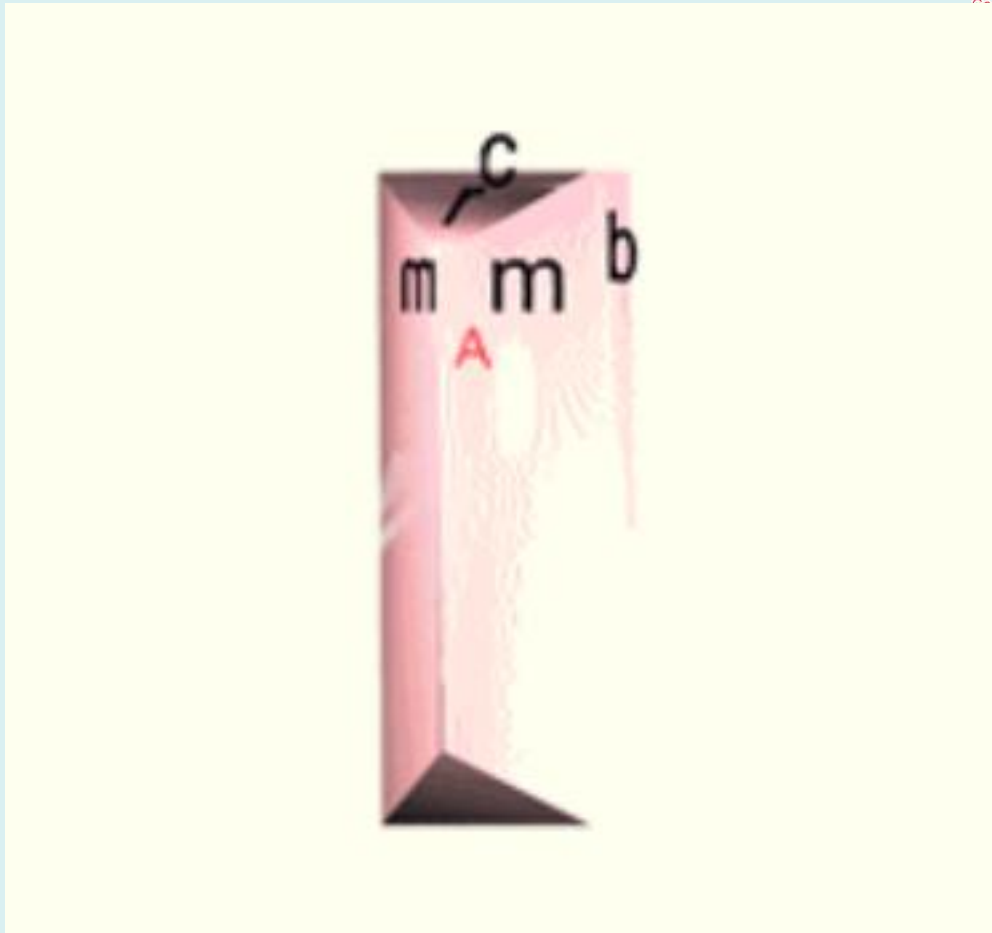
两个或多个单体相互穿插，接合面常曲折而复杂。



两个单体贯穿形成
(正长石)

多个单体以相同的双晶律
贯穿形成 (文石三连晶)

多个单体以不同的双晶律
贯穿形成。 (十字石)



多个单体以不同的双晶律贯穿形成
(十字石穿插双晶)



1.平行连生内部格子构造特点

2.双晶要素的内容；

3.常见的双晶类型。



思考



- ◆ 双晶要素与对称要素的区别是什么？
- ◆ 双晶要素决不可能平行单体中的相类似的对称要素，为什么？

第七章 晶体结构简介

晶体是具有格子构造固体，其内部质点在三维空间都是呈周期重复的规则排列。

每一种晶体都具一定的内部结构，晶体结构及其化学组成是决定晶体一切性质和现象的根本因素。

目录

一

平行六面体的选择

二

各晶系平行六面体的形状和大小

三

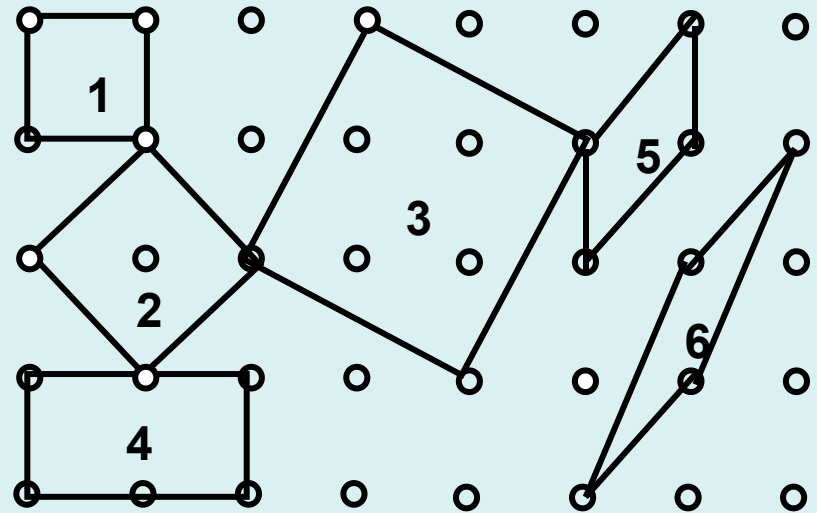
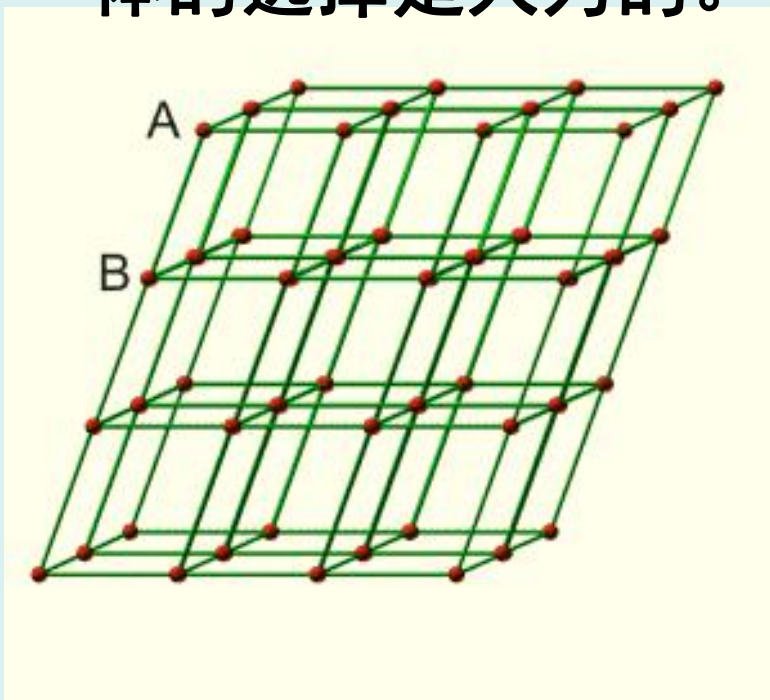
平行六面体中结点的分布

四

十四种布拉维格子

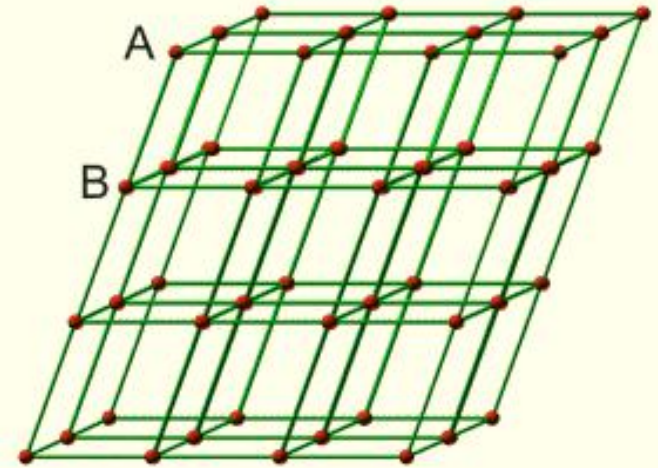
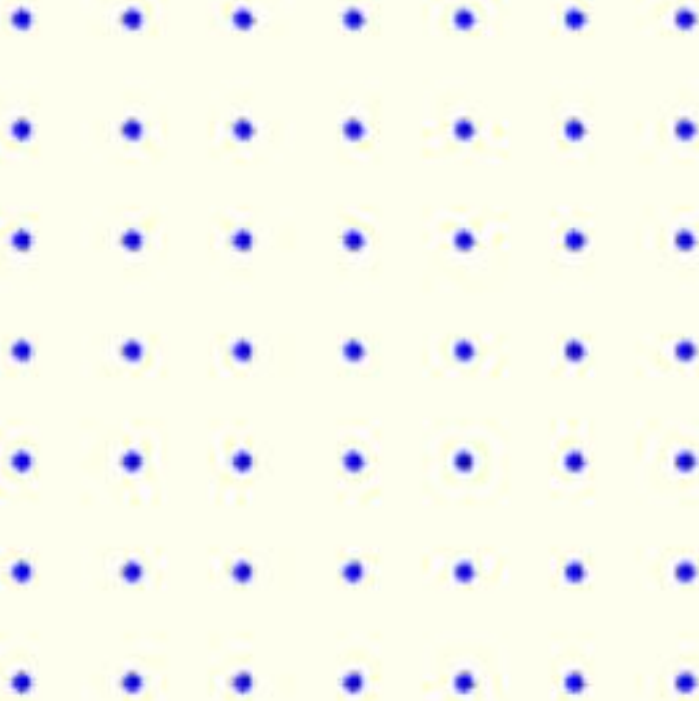
一. 平行六面体的选择

对于每一种晶体结构而言，其结点（相当点）的分布是客观存在的，但平行六面体的选择是人为的。



平行六面体的选择原则如下：

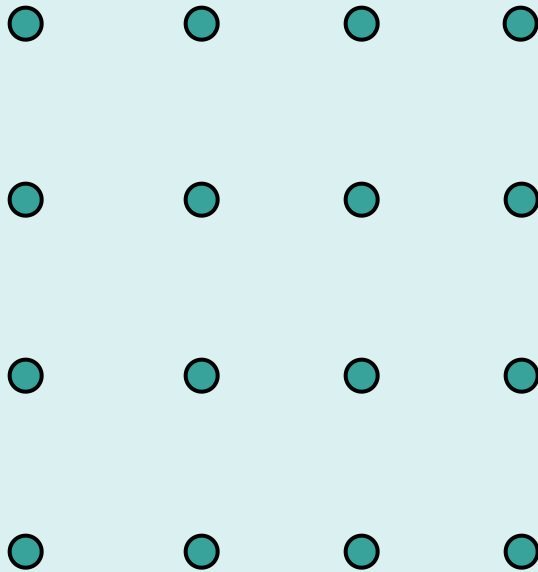
- 1) 所选取的平行六面体应能反映结点分布整体所**固有的对称性**。
- 2) 在上述前提下，所选取的平行六面体中棱与棱之间的**直角关系力求最多**。
- 3) 在满足以上二条件的基础上，所选取的平行六面体的**体积力求最小**。
平行六面体的选择原则实际上和晶体定向时坐标轴的原则是一致的，即尽量使 $a = b = c$ ； $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



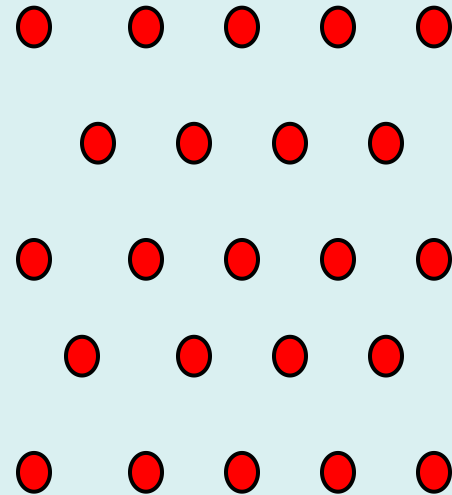
// (001) 的截面

图中点的分布具四方对称的特点，显然按第**A**种方法来选取平行六面体才符合上述原则。第**B**种方法虽然也符合四方对称，但体积太大；第**C**种方法既不符合对称也无直角；第**D**种方法虽然有直角但不符合四方对称。

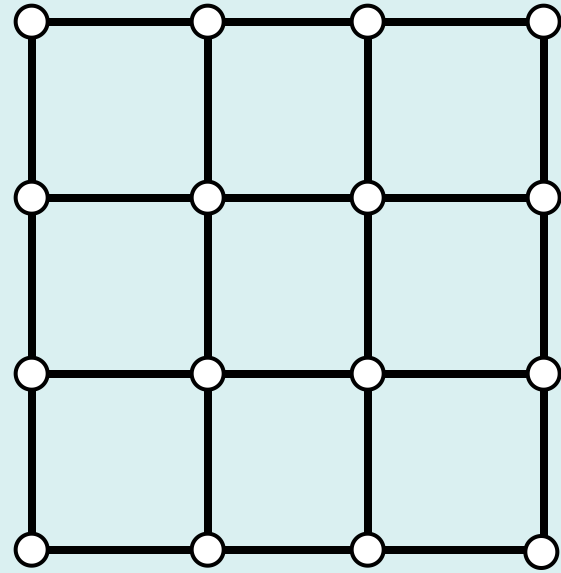
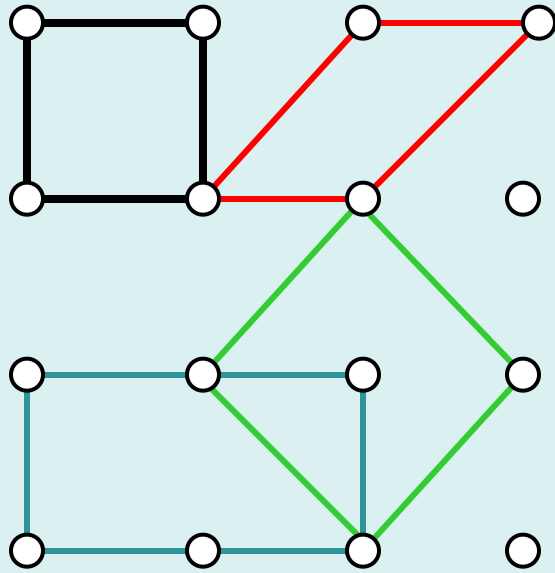
下面两个平面点阵图案中，请同学们画出其空间格子：



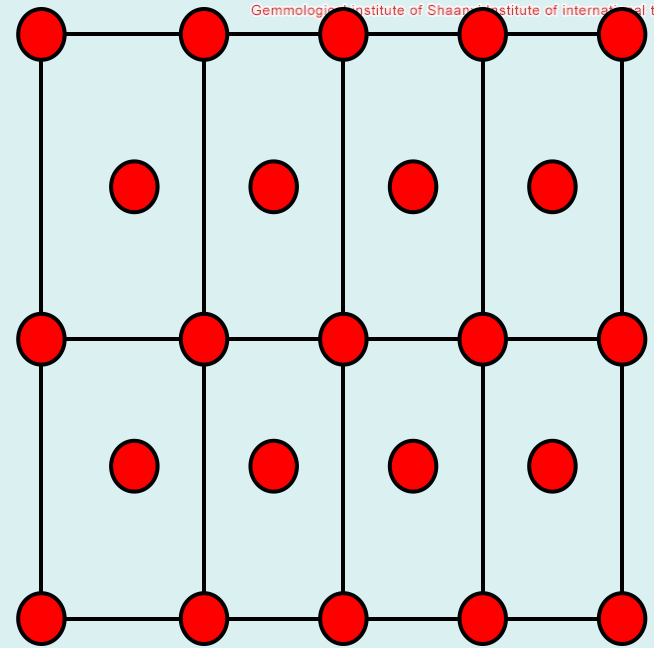
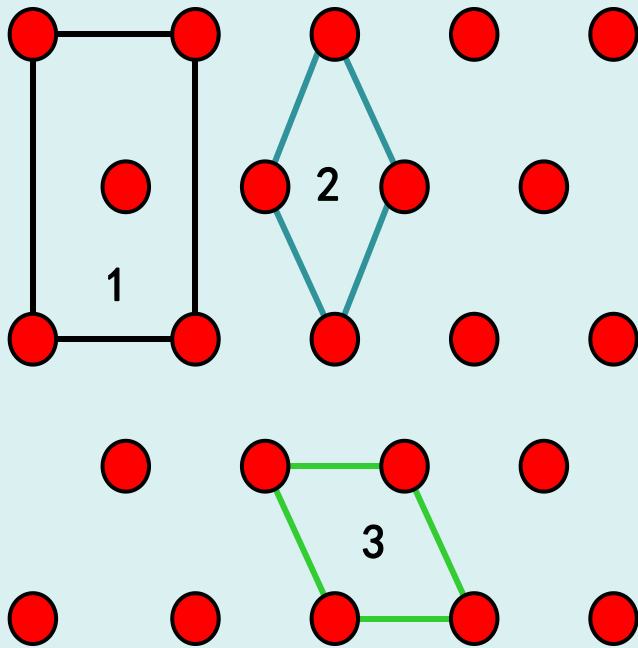
L^44P



L^22P



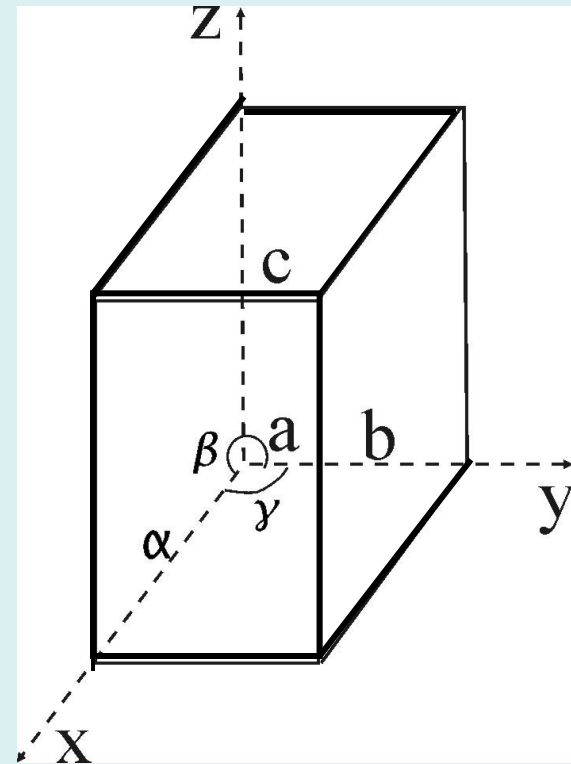
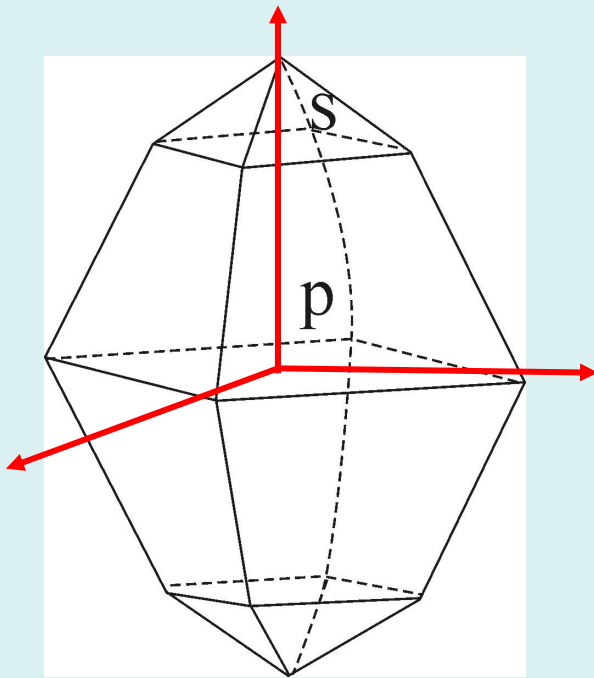
L⁴4P



L²2P

引出一个问题：空间格子可以有带心的格子。

上述画格子的条件实质上与前面所讲的晶体定向的原则是一致的，也就是说，我们在宏观晶体上选出的晶轴就是内部晶体结构中空间格子三个方向的行列。



二. 各晶系平行六面体的形状和大小

平行六面体的**形状和大小**是用它的三根棱长（轴长） a 、 b 、 c 及棱间的夹角（轴角） α 、 β 、 γ 表征。这组参数（ a 、 b 、 c ； α 、 β 、 γ ）即为**晶胞参数**。

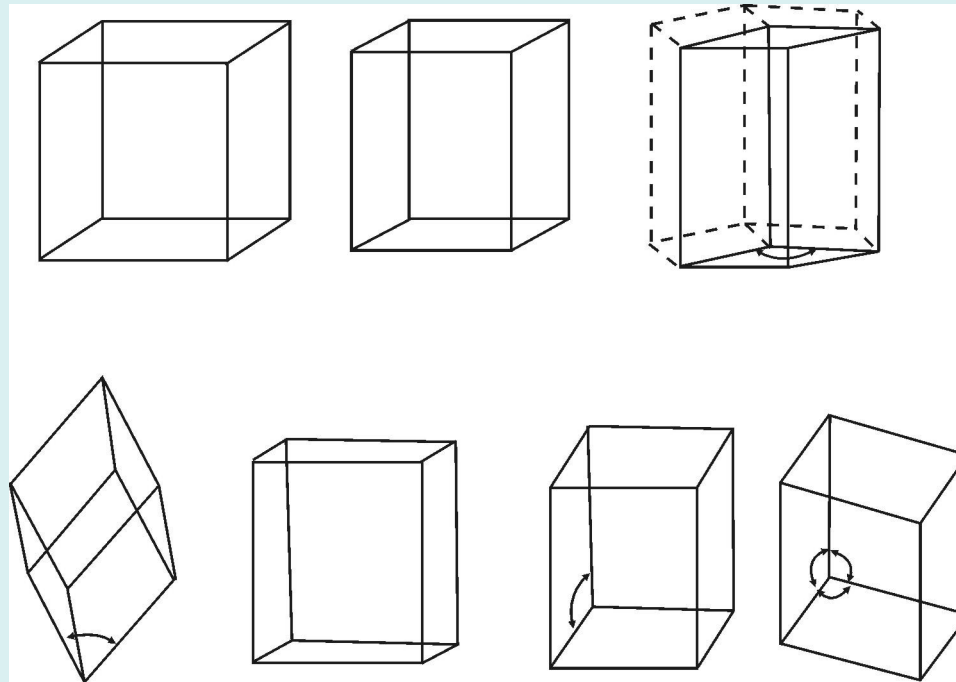
在晶体宏观形态我们可以得到各晶系的**晶体常数特点**，是根据晶轴对称特点得出的。宏观上的**晶体常数与微观的晶胞参数**是对应的，但微观的晶体结构中我们可以得到晶胞参数的具体数值。

七个晶系平行六面体的形状不同，对称性质不同，晶胞参数各异，平行六面体形状和晶格常数特点(见下图)。

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 $a=b\neq c$;
 $\alpha=\beta=90^\circ \gamma=120^\circ$



三方晶系 $a=b\neq c$
 $\alpha=\beta=90^\circ, \gamma\neq 90^\circ$

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

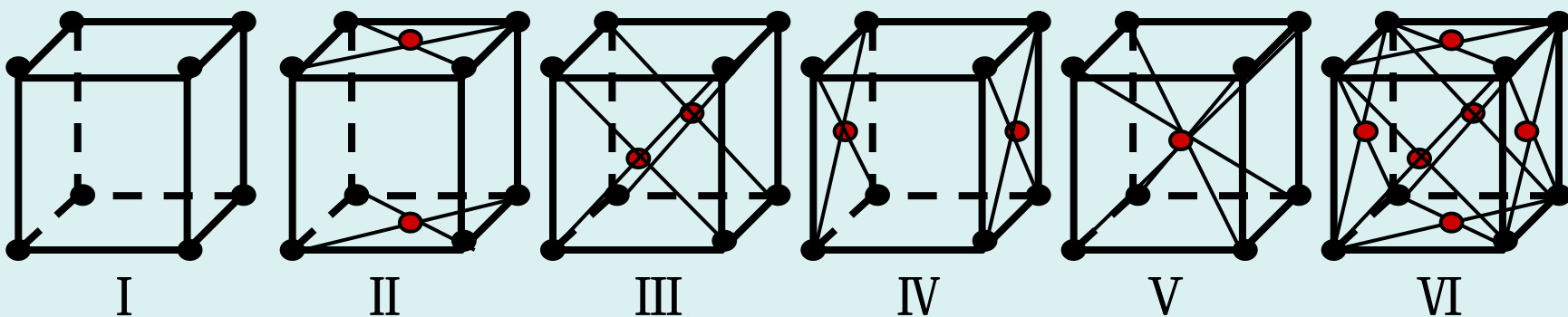
单斜晶系 $a\neq b\neq c$
 $\alpha=\gamma=90^\circ$
 $\beta\neq 90^\circ$

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

三. 平行六面体中结点的分布（即格子类型）

在按选择原则选择出的平行六面体中，结点（相当点）的分布只能有四种可能的情况，与其对应可分为四种格子类型。

不同类型格子结点在平行六面体中的分布特点。



I 为原始格子 II、III、IV 为底心格子（C、A、B心） V 为体心格子 VI 为面心格子

- 1) **原始格子** (P 、注：三方晶系菱面体原始格子用 R 表示)：结点分布于平行六面体的八个角顶上。
- 2) **底心格子** (C 、 A 、 B)：结点分布于平行六面体的角顶及某一对面的中心。
- 3) **体心格子** (I)：结点分布于平行六面体的角顶和体中心。
- 4) **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。

请同学们注意！！

把底心、体心、面心格子称为带心的格子，在前面画格子的例子中已经知道有带心格子的存在，这是因为**有些晶体结构在符合其对称的前提下不能画出原始格子，只能画出带心的格子。**

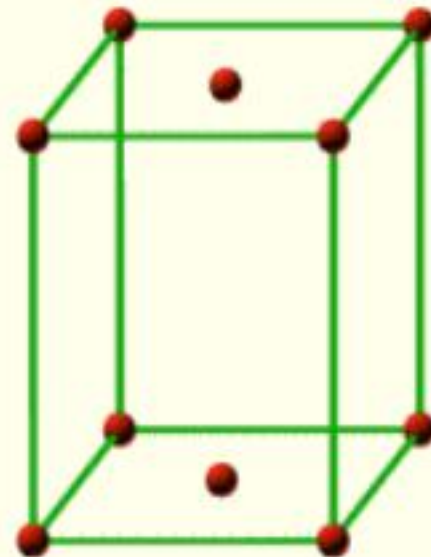
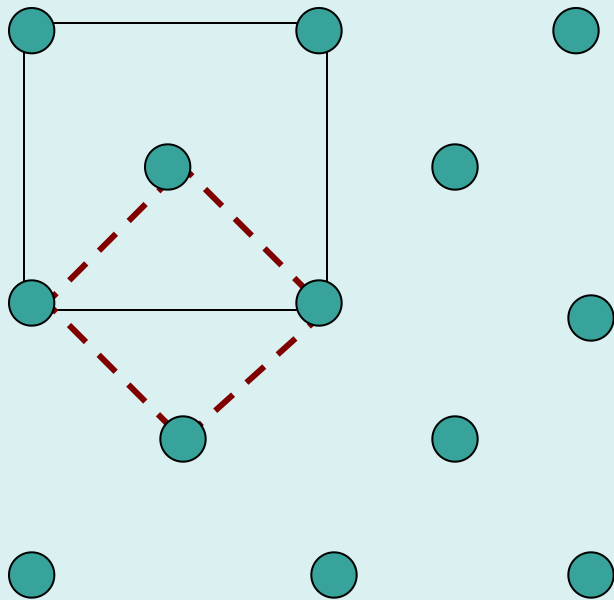
四. 十四种布拉维格子

七个晶系→七套晶格常数→七种平行六面体种形状。每种形状有四种类型，那么就应该有 $7 \times 4 = 28$ 种空间格子？

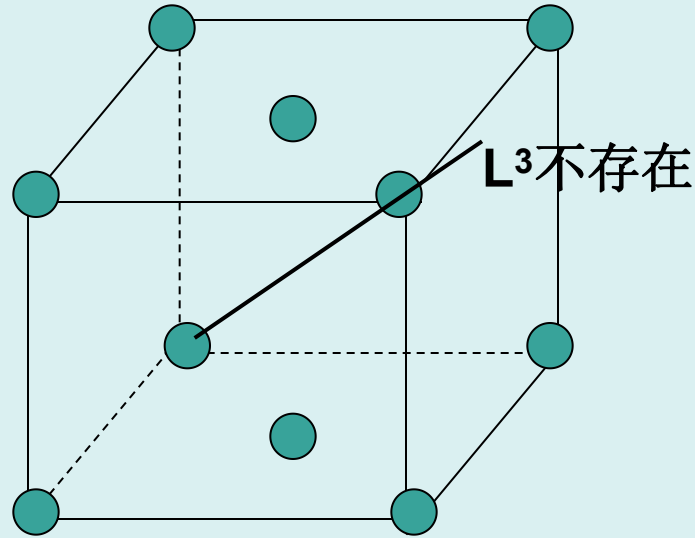
但在这28种中，某些类型的格子彼此重复并可转换，还有一些不符合某晶系的对称特点而不能在该晶系中存在，因此，只有14种空间格子，也叫**14种布拉维格子**。（A.Bravais于1848年最先推导出来的）

举例说明：

- 1、**四方底心格子**可转变为体积更小的四方原始格子；
- 2、在等轴晶系中，若在立方格子中的一对面对面的中心安置结点，则完全不符合等轴晶系具有 $4L^3$ 的对称特点，故不可能存在**立方底心格子**。



例 1：四方底心格子 = 四方原始格子



例 2：立方底心格子不符合等轴晶系对称

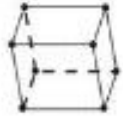


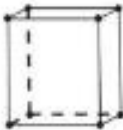



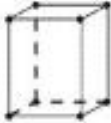



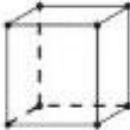
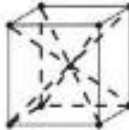
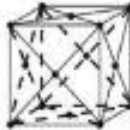
例如：

- 1、三斜面心格子 (F) 可以转变为三斜原始格子 (P)
- 2、单斜 B 心格子可以转变为单斜原始格子 (P)
- 3、三方体心 (I) 可以转变为三方原始格子 (P)

还应指出的是：

**六方原始格子为六方柱的顶底面加心，
不要误认为六方底心格子。**

十四种空间格子见表 2-1 (P10)。

	原始格子	底心格子	体心格子	面心格子
三斜晶系		C=P	I=P	F=P
单斜晶系			I=C	F=C
斜方晶系				
四方晶系		C=P		F=I
三方晶系		不符合对称	I=R	F=R
六方晶系		不符合对称	不符合空间格子条件	不符合空间格子条件
等轴晶系		不符合对称		

第八章 晶体化学

目录

1

晶体结构的紧密堆积原理

2

配位关系与配位多面体

3

类质同象

4

同质多象

晶体结构的紧密堆积原理

- 1. 最紧密堆积原理

晶体结构中，质点之间倾向于尽可能的相互靠近以占据最小空间；使彼此之间的作用力达到平衡状态，以达到内能最小，使晶体处于最稳定状态。

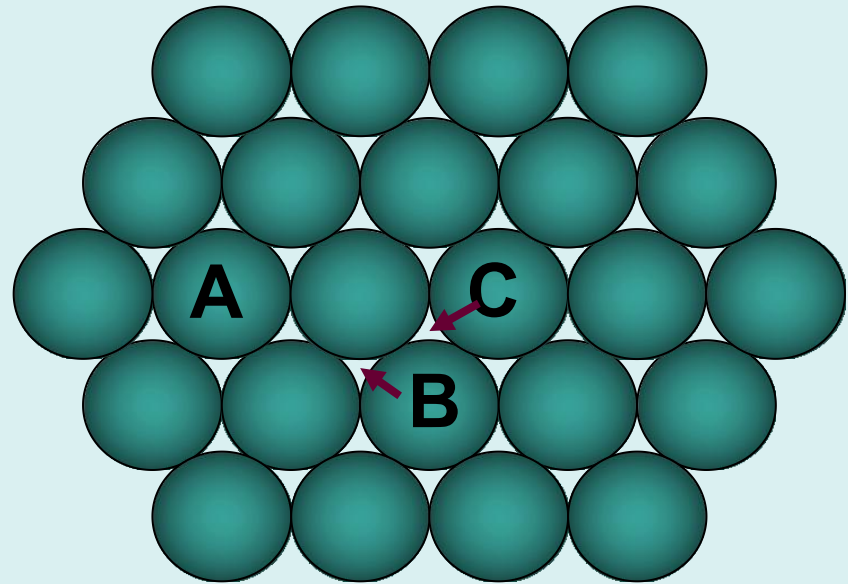
为什么可将某些晶体内的质点作为球体来考虑？

在**离子键**和**金属键**的晶体结构中，由于离子键和金属键**没有方向性和饱和性**，核外电子云的分布是球形，可以作为球形来考虑。所以对于**离子键和金属键**的晶体结构，从几何学的角度来看，可以用球体**最紧密堆积原理**来研究。

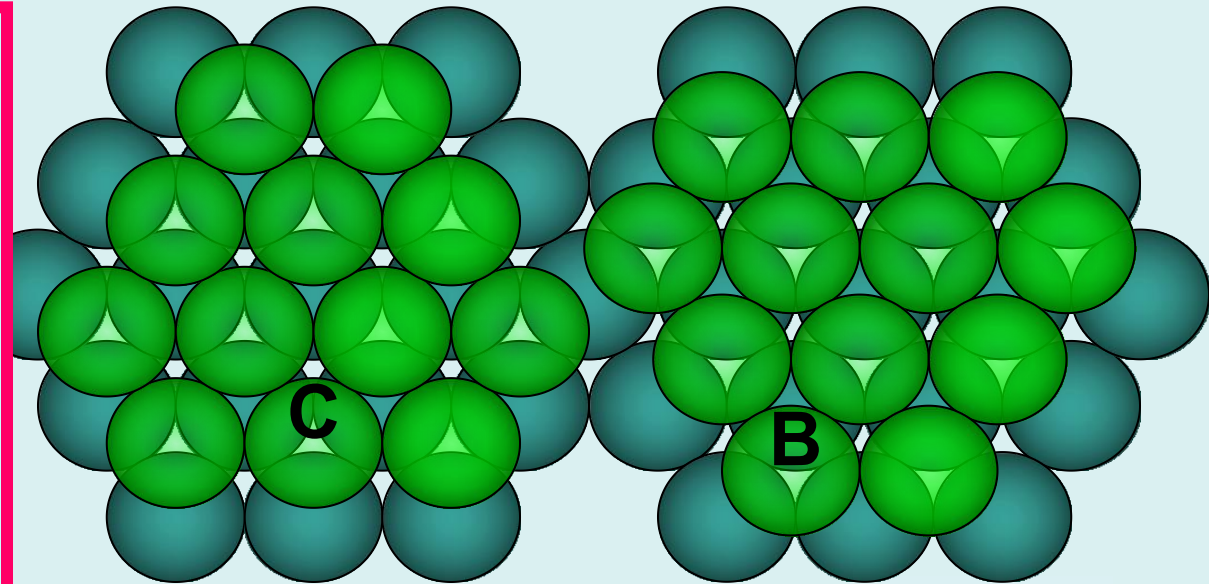
等大球最紧密堆积

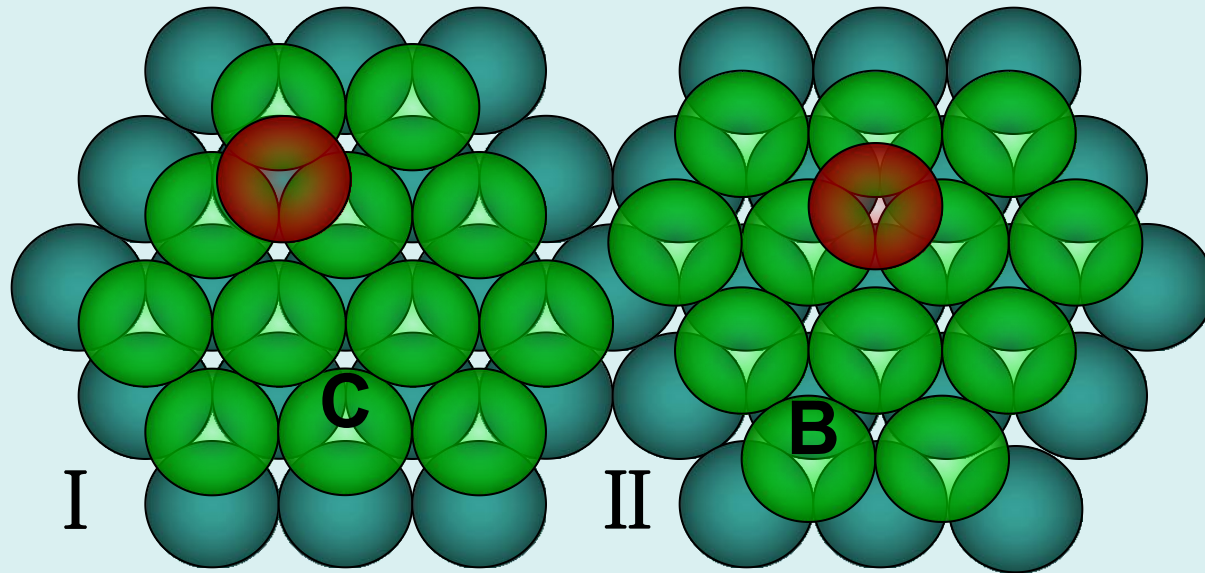
1、堆积过程与基本形式

第一层堆积：形成两种三角形空隙B位、C位（第1层球所在位置标注为A）



第2层堆积：只能在上述B位或C位堆积，不能同时在这两种位置上堆积，即形成AB或AC，AB与AC是等效的。



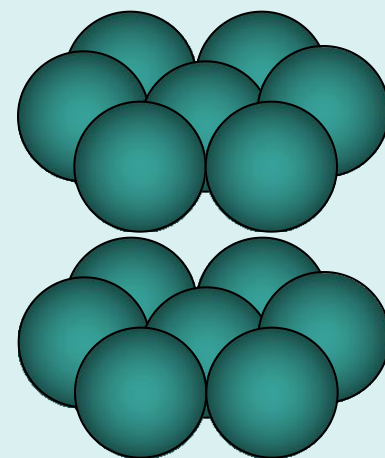
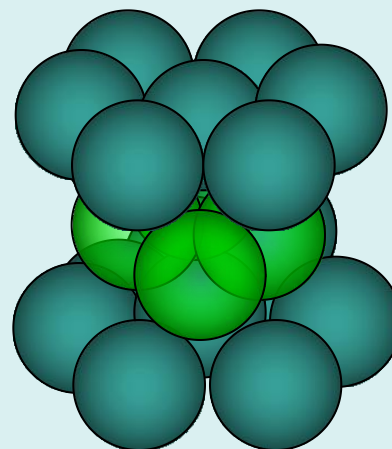
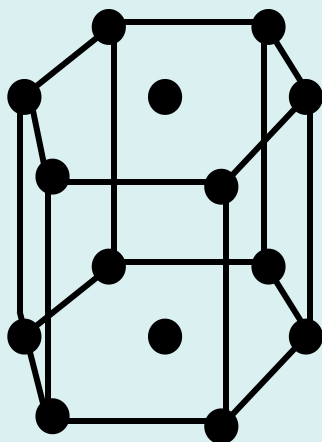
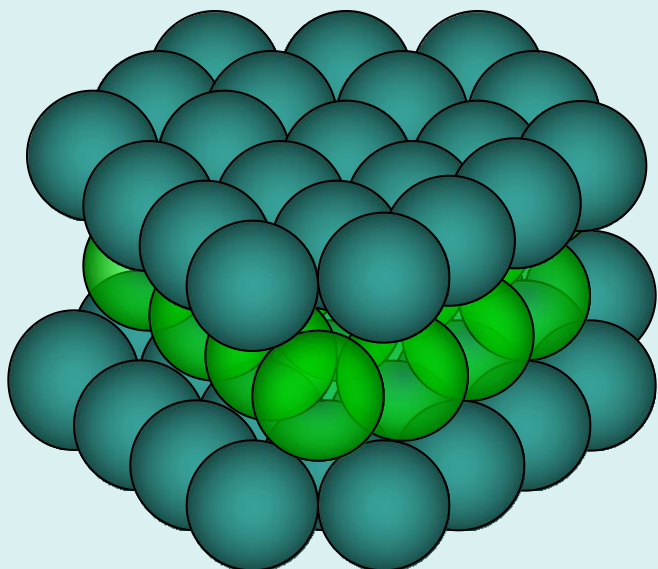
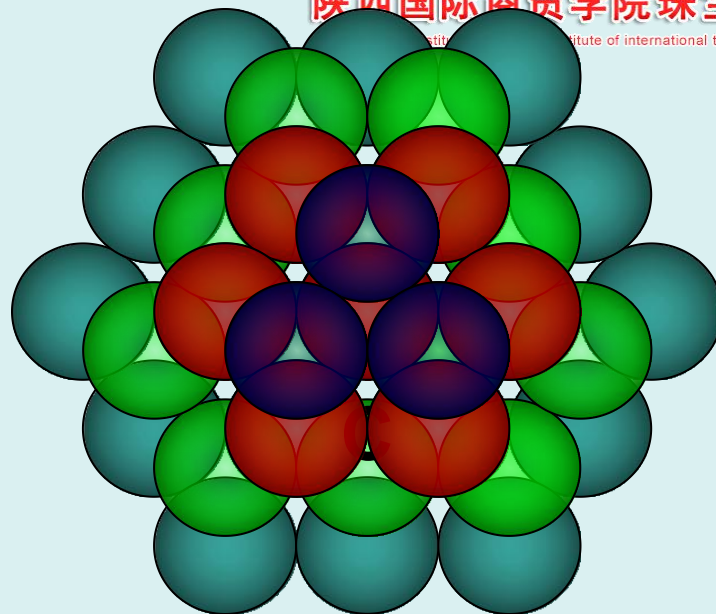


第三层球体堆积有二种方式：有可能与第1层所处的位置完全相同，即形成ABA堆积形式；也可能与第1层、第2层不同位置，形成ABC堆积形式。

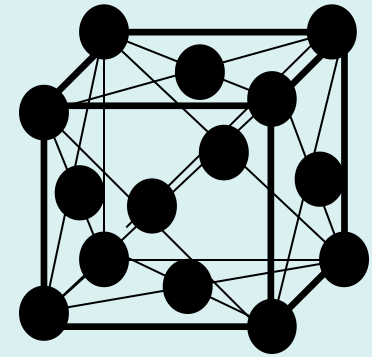
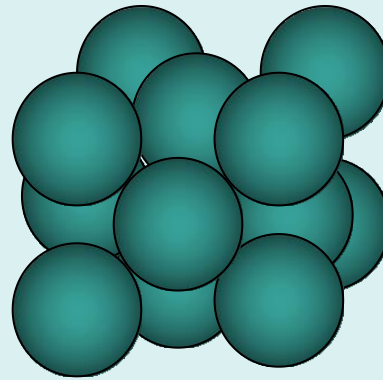
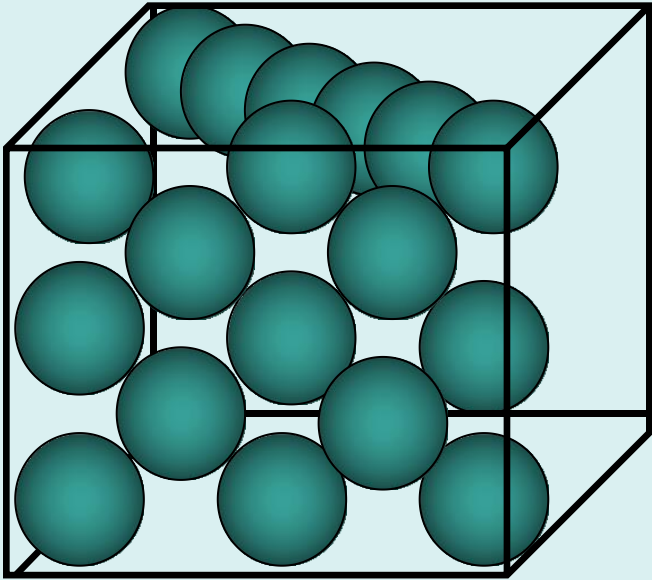
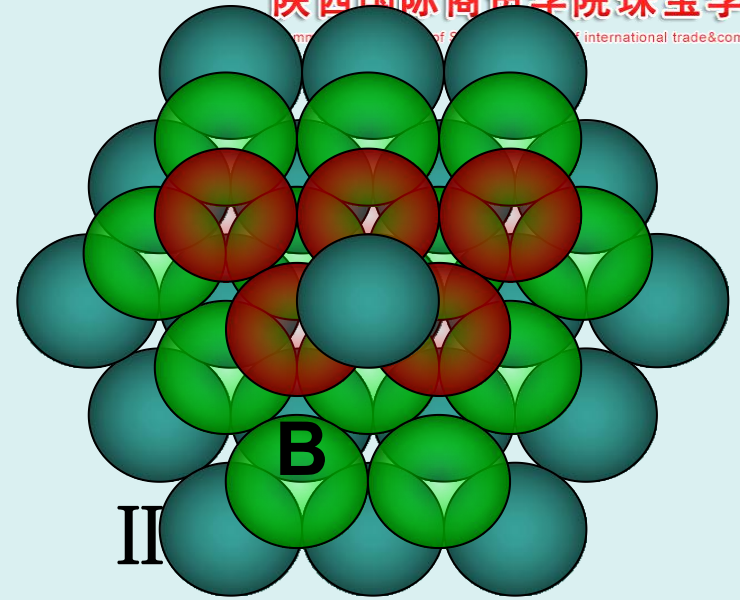
第4层、第5层……堆积：只能在A、B、C位置上任选一种，不可能超出这3种位置，并且不能与最临近的一层相同。

2、堆积结构的对称性

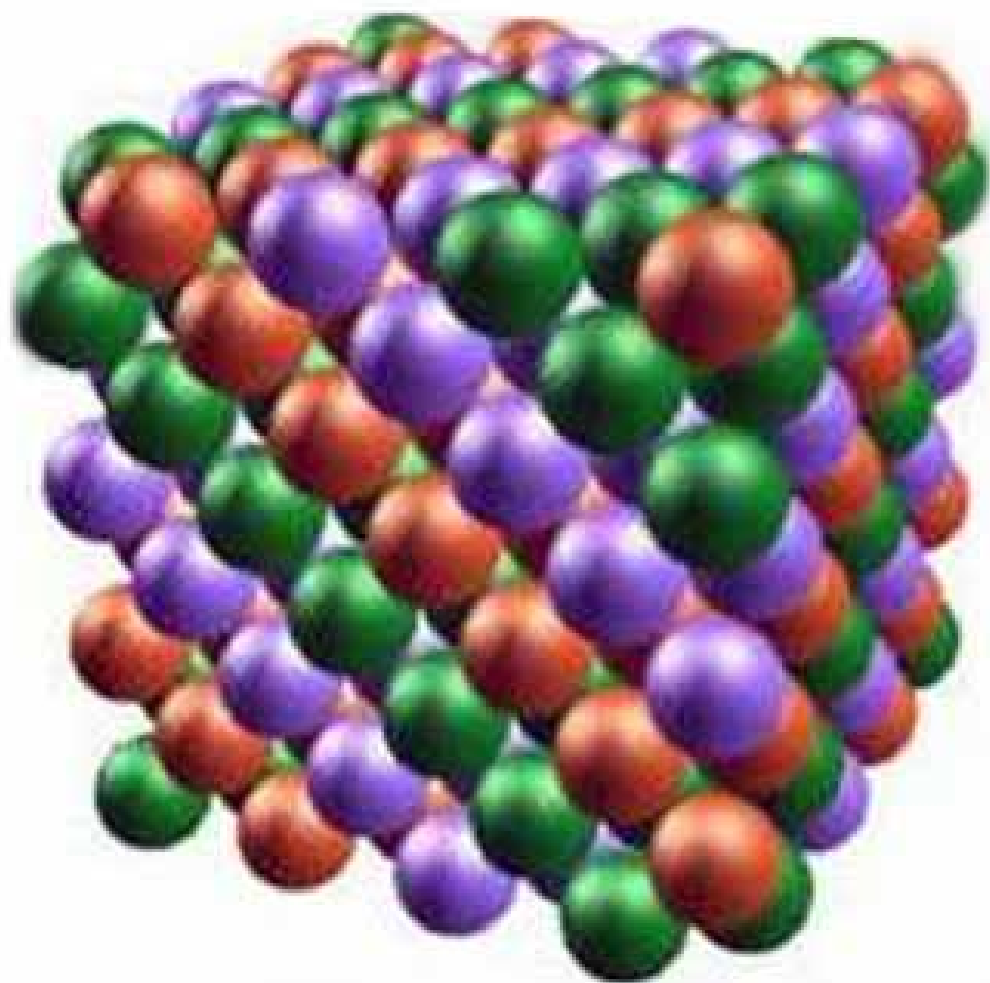
在 I 种方式中，使第四层球体与第二层重合，即按 **ABABAB.....**或**ACACAC.....**规律堆积，与空间格子中的六方格子一致，称为六方最紧密堆积



第三层球体在第二种方式基础上，第四层与第一层重复，即按**ABCABC**。。。堆积，则球体的分布与空间格子中立方面心格子一致，称为立方最紧密堆积，平行于立方格子 $\langle 111 \rangle$ 方向。



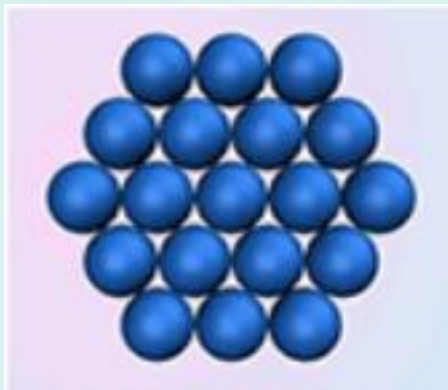
立方面心格子



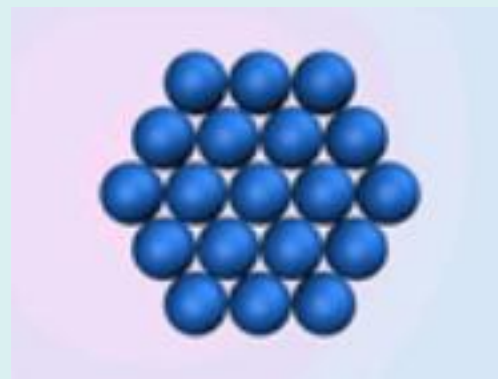
3、堆积结构中的空隙

等大球最紧密堆积结构中，空隙占25.95%。

空隙存在形成有两种：**四面体空隙和八面体空隙。**



四面体空隙

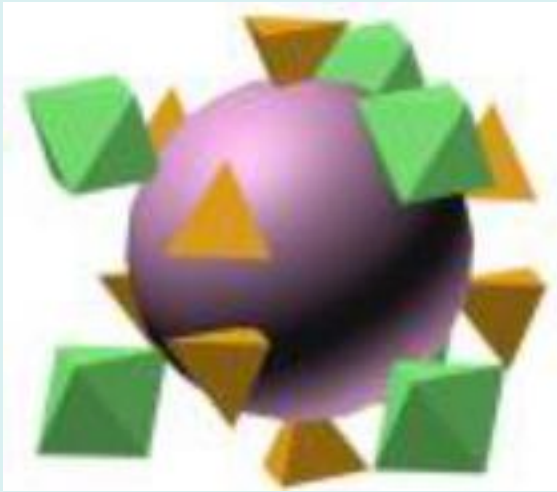


八面体空隙

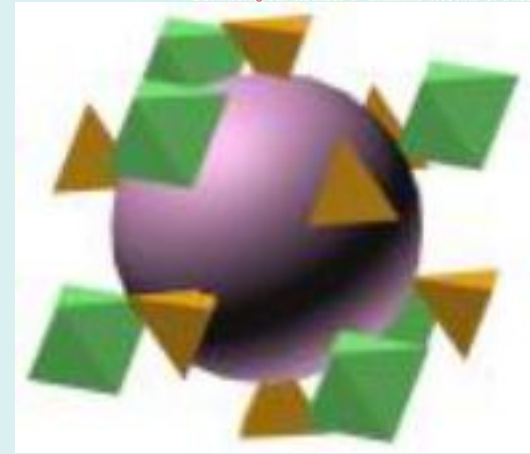
四面体空隙：处于四个球体包围之中的空隙，此四个球体中心之连线恰好联成一个四面体的形状。

八面体空隙：处于六个球体包围之中，此六个球体中心之连线恰好联成一个八面体的形状。

不管是立方最紧密堆积还是六方最紧密堆积，一个球周围分布**8**个四面体空隙和**6**个八面体空隙。



(a)



(b)

图 一个球周围的四面体与八面体空隙分布规律
(a.在六方最紧密堆积中; b.在立方最紧密堆积中)

空隙的分布与数量:

思考: N个球做最紧密堆积,形成的四面体空隙是多少? 八面体空隙是多少?

根据一个球周围分布着6个八面体空隙和8个四面体空隙, 以及一个八面体由6个球组成、一个四面体由4个球组成的数值关系, 我们可以计算得出: n 个球作最紧密堆积形成的八面体空隙数为 n 个, 四面体空隙数为 $2n$ 个。

• 等大球体的最紧密堆积

第一层(A)时: 两种空隙位置(三角形的方向)

第二层(B)时: 两种可能堆积方式, 两种空隙位置(穿透, 未穿透层)

第三层(C)时: 两种不同的堆积方式,

六方密堆积(HCP): ABAB...

立方密堆积(CCP): ABCABC...

• 最紧密堆积的空隙

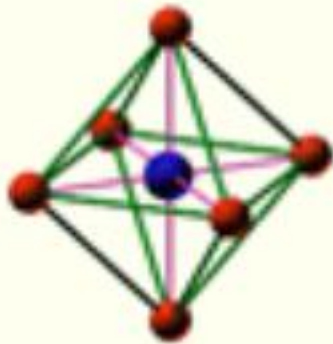
四面体空隙: 处于四个球体包围之中的空隙, 此四个球体中心之连线恰好联成一个四面体的形状

八面体空隙: 处于六个球体包围之中, 此六个球体中心之连线恰好联成一个八面体的形状

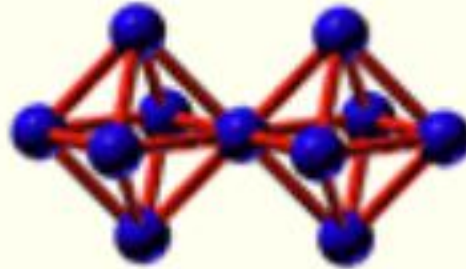
当有 n 个等大球体作密堆积时, 必定有 n 个八面体空隙与 $2n$ 个四面体空隙存在!

二、配位数与配位多面体

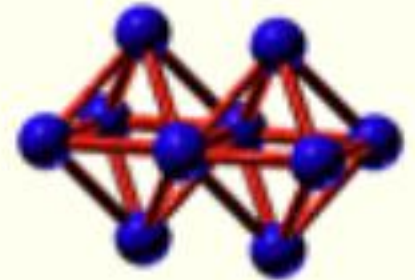
- 1. 概念
- **配位关系**：在晶体结构中，原子间或异号离子间相互结合而形成的相互配置关系，便是所谓的配位 (coordination) 关系。
- **配位数**：晶体结构中每个原子或离子的周围，与之最为临近的（呈配位关系的）原子或异号离子的数目称为该原子或离子的配位数。
- **配位多面体** (coordination polyhedron)：晶体结构中，以任一离子或原子为中心，将其周围与之成配位关系的原子或异号离子的中心连线所构成的几何图形称为配位多面体。可分为金属键晶体和离子键晶体。



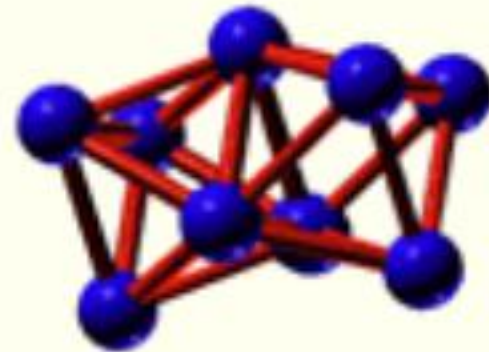
共棱共角顶连接



共角顶连接



共棱连接



共面连接

- 2. 配位数与配位多面体的关系

配位数和配位多面体都是用来表征晶体结构中质点相互配置状况的。

但是晶体结构中原子或离子的配位数相同，而配位多面体的形状可以相同也可以不同（如，三方双锥和四方单锥的配位数都是5），所以用配位多面体来表征晶体结构的意义更为确切。

- 3. 影响配位数的因素

- 1) 内因

- 质点的相对大小
- 堆积的紧密程度：一般对于同种成分的矿物，做紧密堆积的配位数大于不做紧密堆积的矿物。
- 质点间的化学键性质：一般情况下，金属键 $>$ 共价键。

• 3. 影响配位数的因素

2) 外因

- **温度：升高温度导致配位数降低；**

例如： Al^{3+} 有4次和6次两种配位数，在低温下形成的长石和似长石等矿物中呈4次配位，而在低温下形成的高岭土等黏土矿物中呈8次配位。

- **压力：增加压力导致配位数增大；**

例如： Fe^{2+} 和 Mg^{2+} 一般呈6次配位，但在高压下形成的矿物，如镁铝榴石和铁铝榴石中，则呈8次配位。

- **介质成分**

例如：在硅酸盐岩浆中，碱金属离子浓度的增加，有利于 Al^{3+} 呈4次配位。

三、类质同象

- 1. 概念

晶体结构中某种质点(原子、离子或分子)被它性质类似的质点所代替，仅使晶格常数及物理、化学性质发生规律的变化，而晶格类型（键性和结构类型）并不改变，这种现象称为类质同像。

例如：闪锌矿（ZnS）中 Zn^{2+} 被 Fe^{2+} 替代后，物理性质也随之改变，但不引起晶格类型的变化。

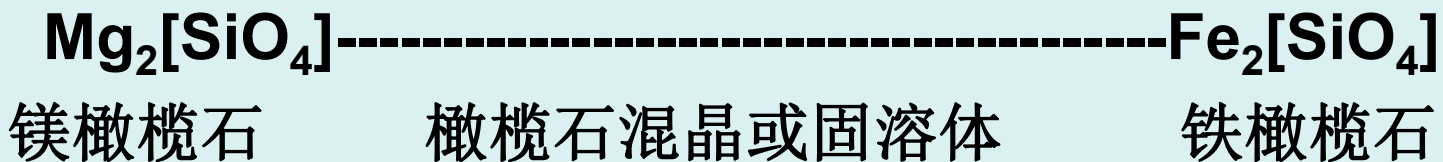
- 2. 类质同象的类型

1) 以发生类质同象替换的组分在晶格中的替换程度：

- ① 完全类质同象（连续类质同象）：晶格中发生替换的组分可以以**任意比例**取代，而晶格类型不改变。
- ② 不完全类质同象（不连续类质同象）：晶格中发生替换的组分不可以连续进行，而是**被限制在一定的范围内**，即超越这个限制范围，晶格类型则会发生改变。

例如：镁橄榄石 $\text{Mg}_2[\text{SiO}_4]$ 晶体，其晶格中 Mg^{2+} 可以被 Fe^{2+} 所替代占据，由此形成的橄榄石 $(\text{Mg}, \text{Fe})_2[\text{SiO}_4]$ 晶体。

并且 Mg^{2+} 被 Fe^{2+} 替代可以任意比例，形成一个系列：



——这种情况称完全类质同像系列。

在闪锌矿 ZnS 中，部分的 Zn^{2+} 可被 Fe^{2+} 类质同象替代，其替代量最大只达到原子数的30.8%，如果代替量大于30.8%，闪锌矿的结构将被破坏。



—这种情况称**不完全类质同像系列**。

• 2. 类质同象的类型

2) 以晶格中相互替代的离子电价是否相等：

① 等价类质同象：相互代替的离子电价相同；

② 异价类质同象：相互代替的离子电价不同。

例如：霓辉石 (Na, Ca) (Fe³⁺, Fe²⁺)[Si₂O₆]

存在两种取代：Na⁺-----Ca²⁺ Fe³⁺-----Fe²⁺

取代后总电价平衡

- 3. 类质同象的影响因素（条件）

- 1) 内因

- **原子或离子的大小：** 大小越接近，越容易发生替代；
- **离子的类型和键型：** 类型和键型应相同；
- **电价平衡：** 替代前后电价应平衡，这是先决条件；如果发生异价替代，则要求同时发生多个替代来达到总电价平衡。

异价替代时电价平衡是主要条件，半径大小退居次要地位。

- 3. 类质同象的影响因素（条件）

- 2) 外因

- 温度：高温易发生，低温不易发生，而且还会发生固溶体离溶；
- 压力：高压不易发生；
- 组份浓度：周围环境的某离子浓度越高越容易替代进入晶格。

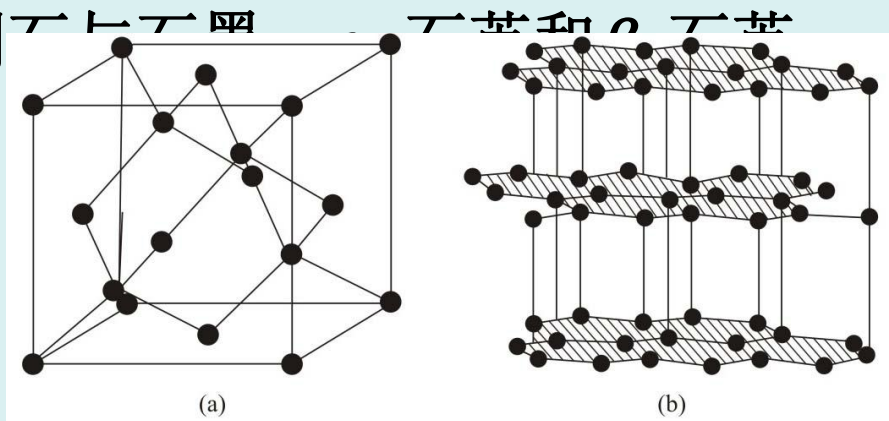
四. 同质多象

- 1. 同质多象的概念

同种化学成分的物质，在不同的物理化学条件(温度、压力、介质)下，形成不同结构的晶体的现象，称为同质多象。这些不同结构的晶体，称为该成分的同质多象变体。

(通常以 α -代表低温变体， β -、 γ -代表高温变体。)

例如：金刚



金刚石

石墨

• 2. 同质多像变体的转变

一种物质的各同质多像变体均有自己特定的形成条件和稳定范围。当外界条件（主要是温度和压力）改变到一定程度时，各变体之间会发生转变。

同质多像变体间的转变温度在一定压力下是固定的，所以在自然界的矿物中某种变体的存在或某种转化过程可以帮助我们推测该矿物所存在的地质体的形成温度。因此，它们被称为“地质温度计”。