

结晶矿物学

胡海燕

联系方式: 18792934952

办公室: 4J106 (东)





第四章 晶体定向与晶体符号

第一节 晶体坐标系的选择

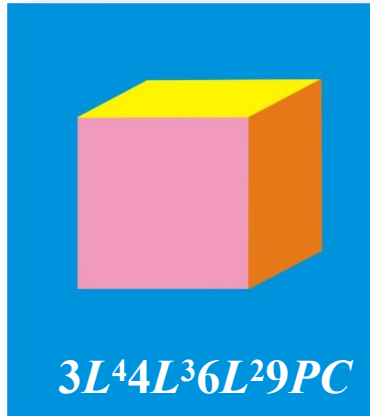
第二节 晶体常数与晶胞参数

第三节 晶面符号

第四节 晶棱符号

第五节 晶带符号与晶带定律

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。



一、晶体定向的概念

1. 晶体定向

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。

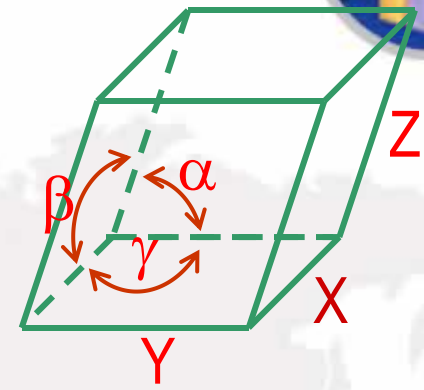
- 选定坐标轴（**晶轴**）和确定个轴单位长（**轴单位**）的比率（**轴率**）



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 $a:b:c$



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

$$\begin{aligned} Y \wedge Z &= \alpha \\ X \wedge Z &= \beta \\ X \wedge Y &= \gamma \end{aligned}$$

晶体常数 轴率 $a:b:c$ 和轴角 α, β, γ \longrightarrow 决定形状

晶胞参数 轴单位 a_0, b_0, c_0 和轴角 α, β, γ \longrightarrow 决定形状和大小

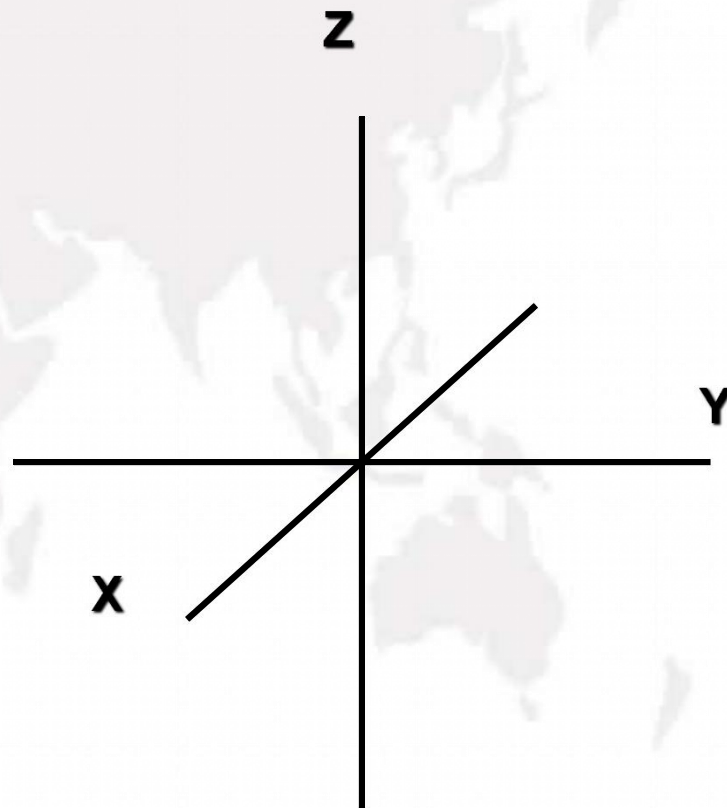
二、各晶系晶体定向的方法



● 晶体的三轴定向

适用于等轴晶系、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



4次轴位置

2次轴位置



$z (L^4)$

$z (L^2)$

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

$y (L^4)$

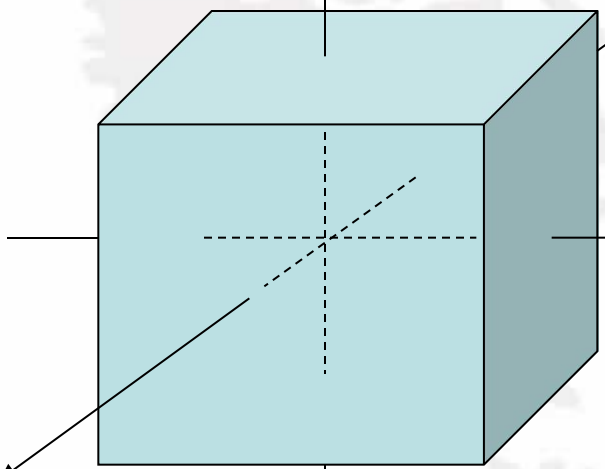
$y (L^2)$

$x (L^4)$

$x (L^2)$

若存在三个相互垂直的 L_i^4 时, 分别作X/Y/Z轴.

等轴晶系定向



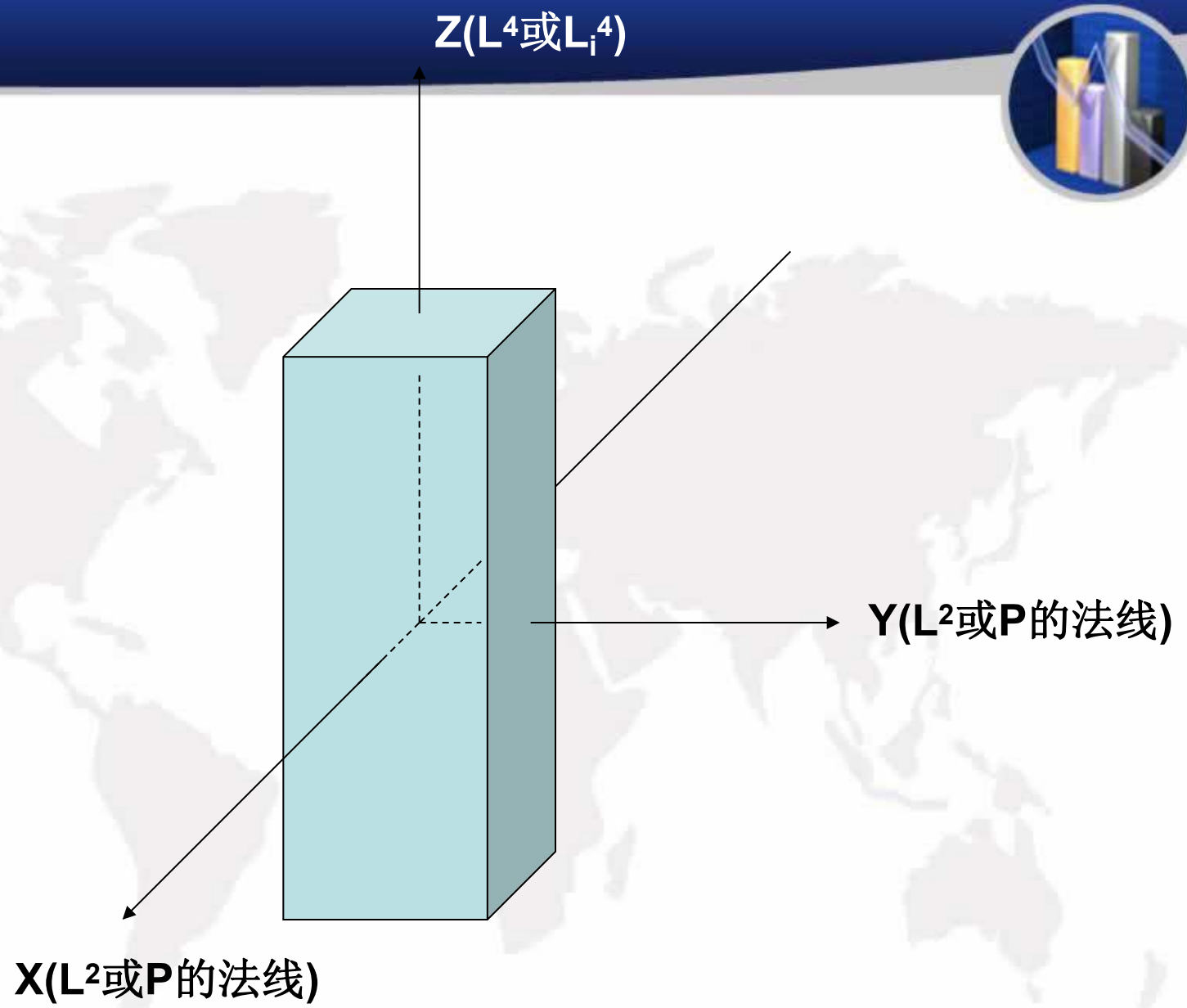


等轴晶系定向原则表

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	



四方晶系定向

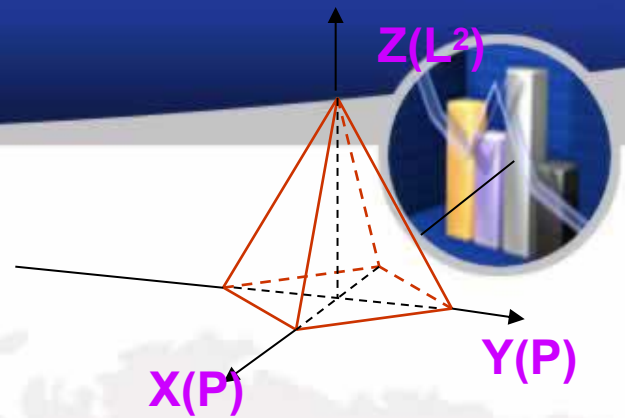
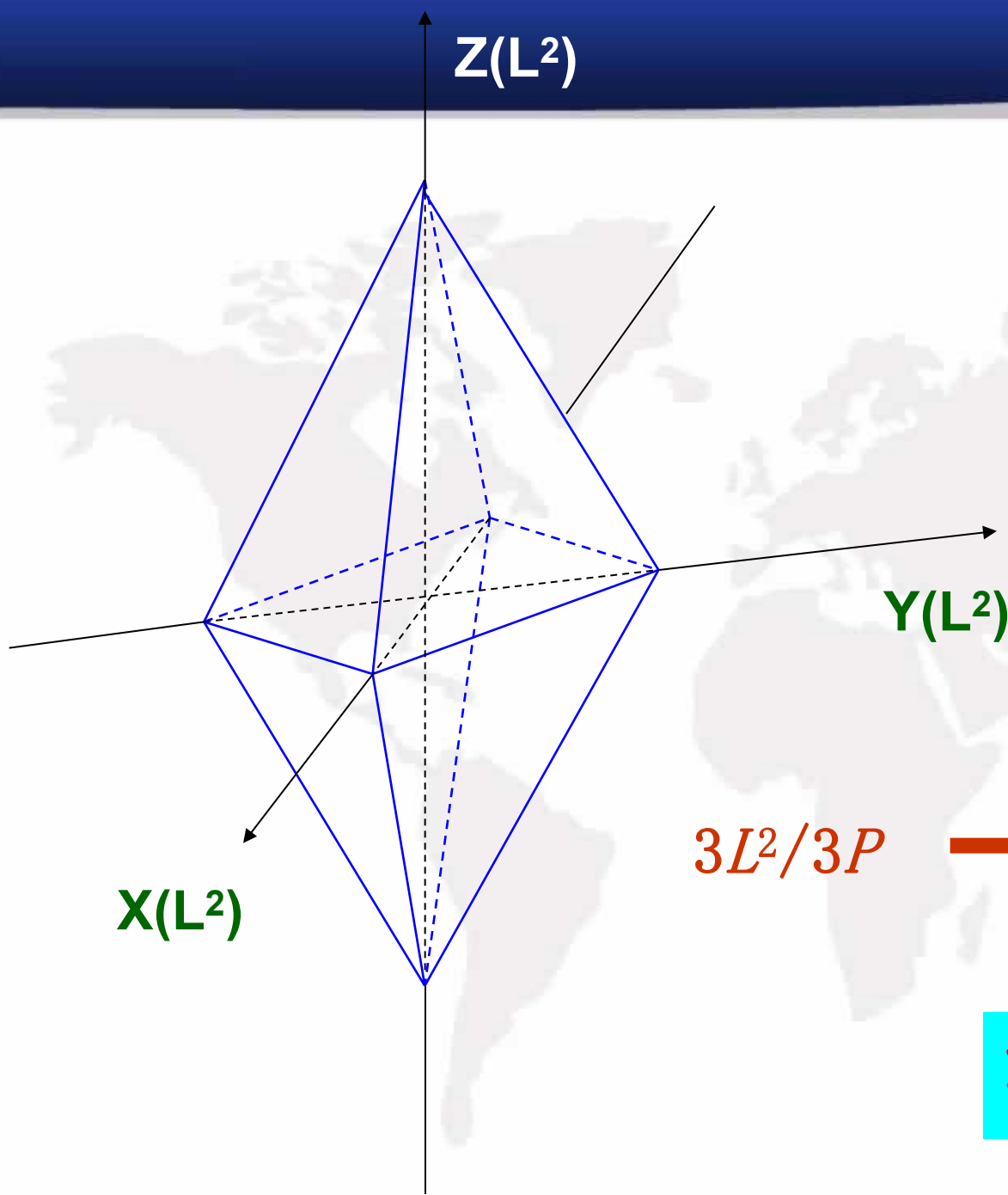


$1L^4 \longrightarrow Z$ 轴 $2L^2_{\perp} / 2P_{\perp} / 2$ 晶棱 $_{\perp} \longrightarrow X Y$ 轴



四方晶系定向原则表

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	
中级晶族	四方晶系	$L^{44}L^2$ 、 $L_i^{42}L^22P$ $L^{44}L^25PC$	唯一高次轴为直立的z轴	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	x轴前后水平， $a=b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
		$L^{44}P$		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^4PC		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		



$L^2 2P$ 对称型

$3L^2/3P \longrightarrow X Y Z$ 轴

斜方晶系定向

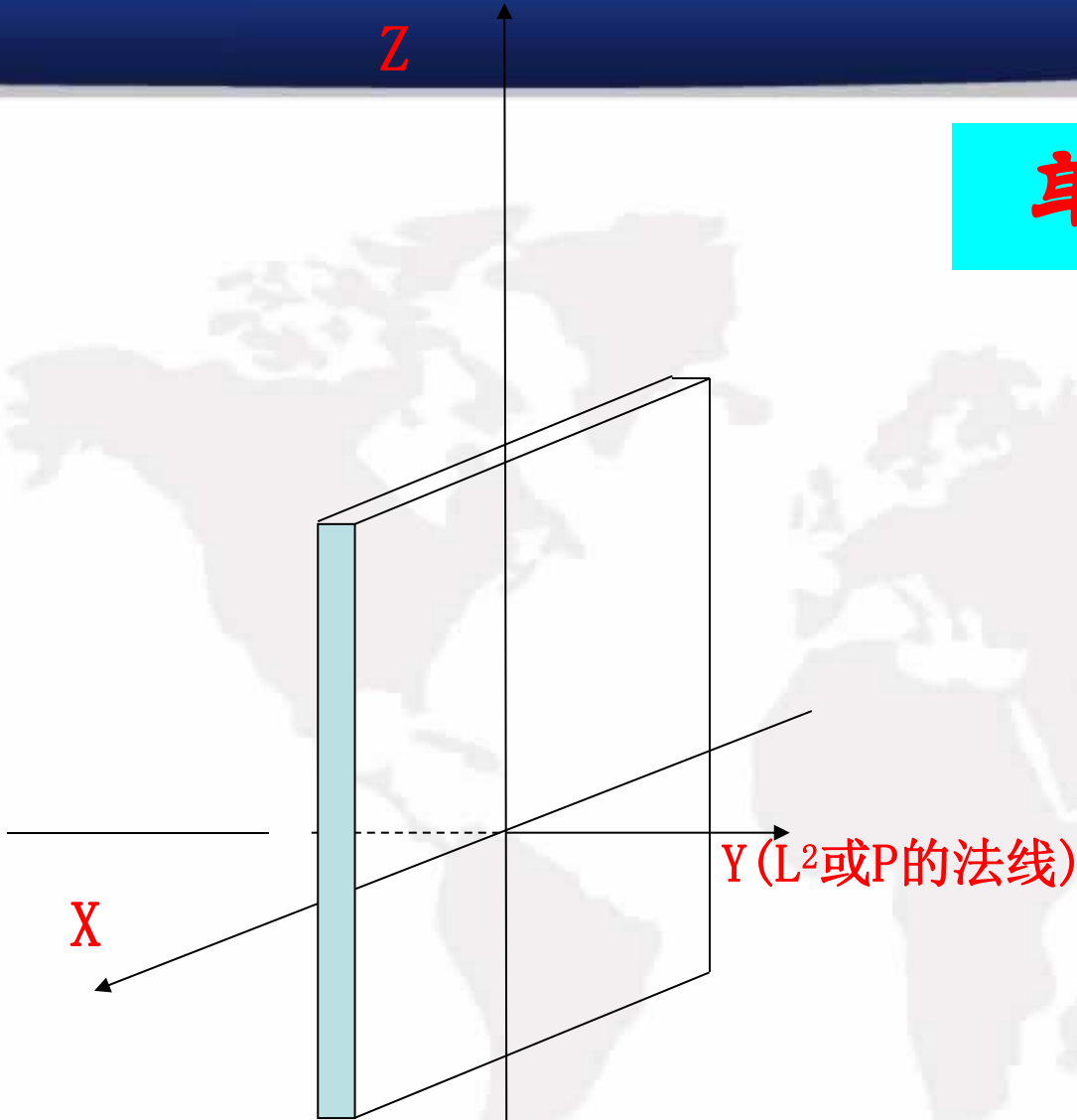


斜方晶系定向原则表

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	
低级晶族	斜方晶系	$3L^2$ 、 $3L^23PC$	三个互相垂直的 L^2 分别为z轴、y轴和a轴	z轴直立	x轴前后水平， y轴左右水平。 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
		L^22P	L^2 为z轴，二个互相垂直的P的法线分别为y轴和x轴		



单斜晶系定向

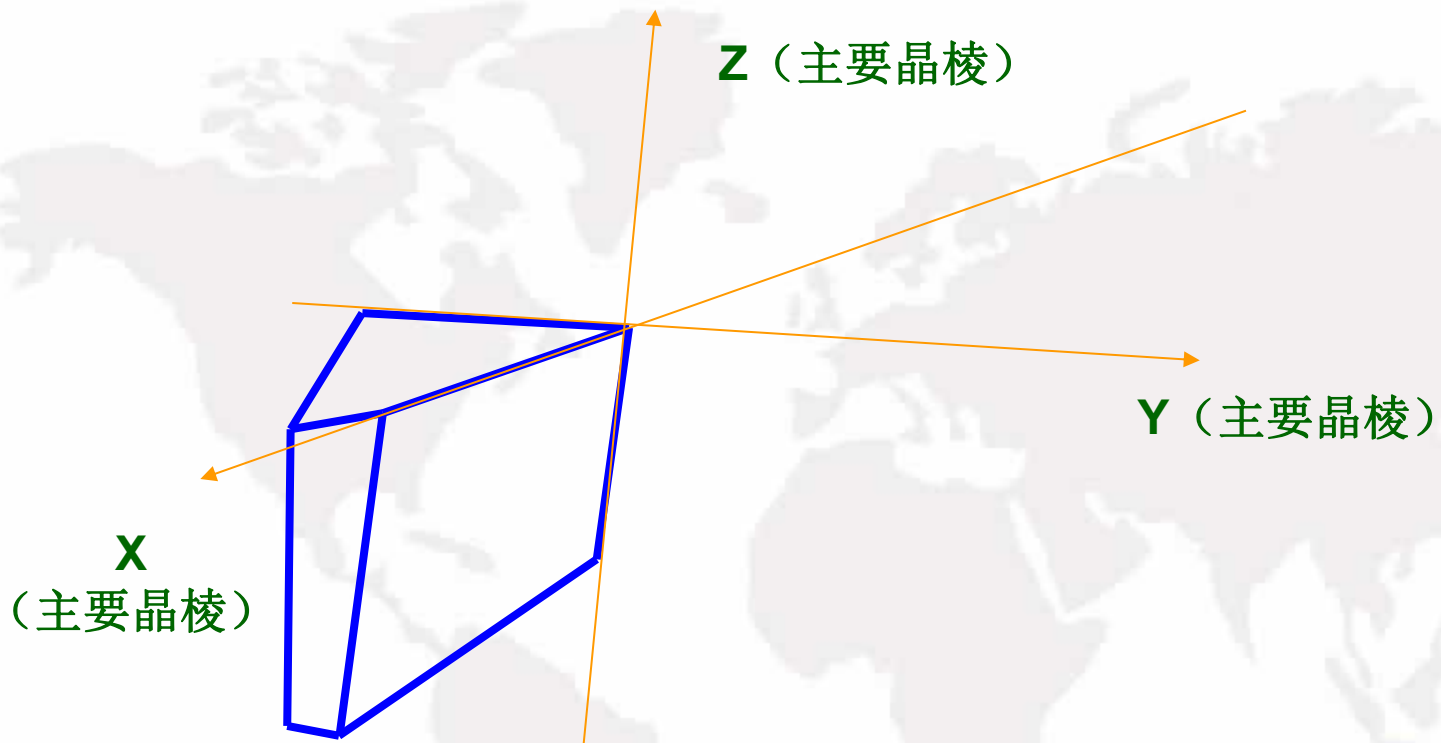


1 $L^2/1P$ 法线 \longrightarrow Y轴, 2 晶棱 \longrightarrow X Z轴



单斜晶系定向原则表

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	
低级晶族	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	z轴直立	y轴左右水平，x轴前后、朝前下方倾。 a≠b≠c α = γ = 90° β > 90°
		P	P的法线为y轴			



三斜晶系定向

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



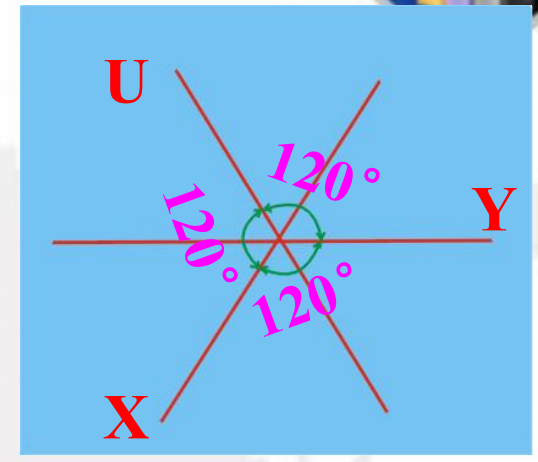
三斜晶系定向原则表

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	
低级晶族	三斜晶系	L^1, C	三个适当的晶棱方向为z轴、y轴和x轴	z轴直立	y轴左右、朝右下方倾， x轴大致前后、朝前下方倾。 $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ $\alpha > 90^\circ, > 90^\circ \beta > 90^\circ$

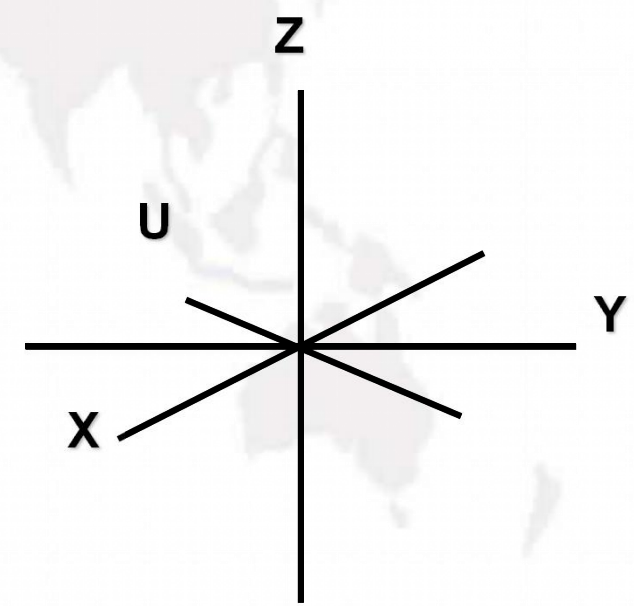


● 晶体的四轴定向

适用于三方、六方晶系。

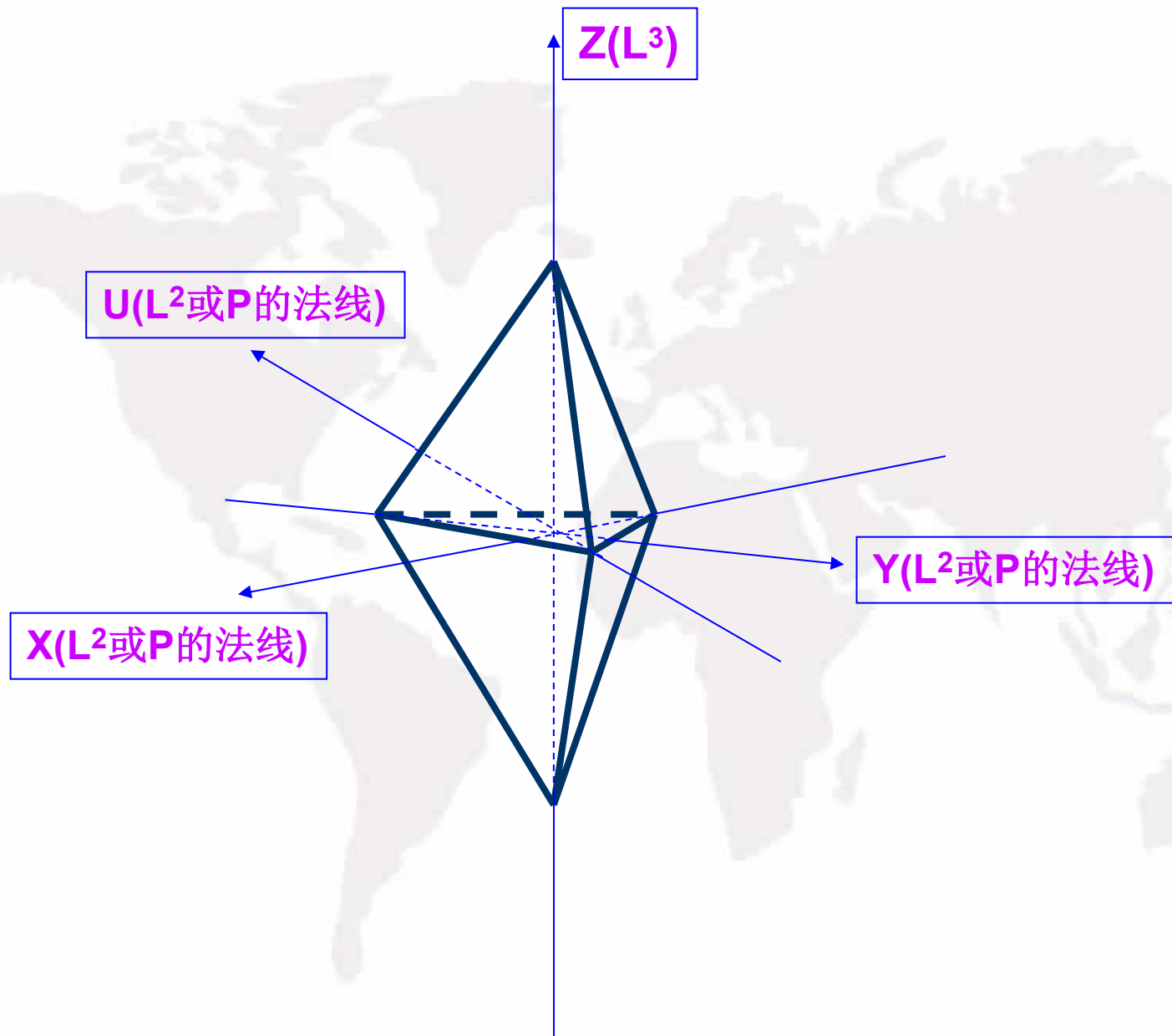


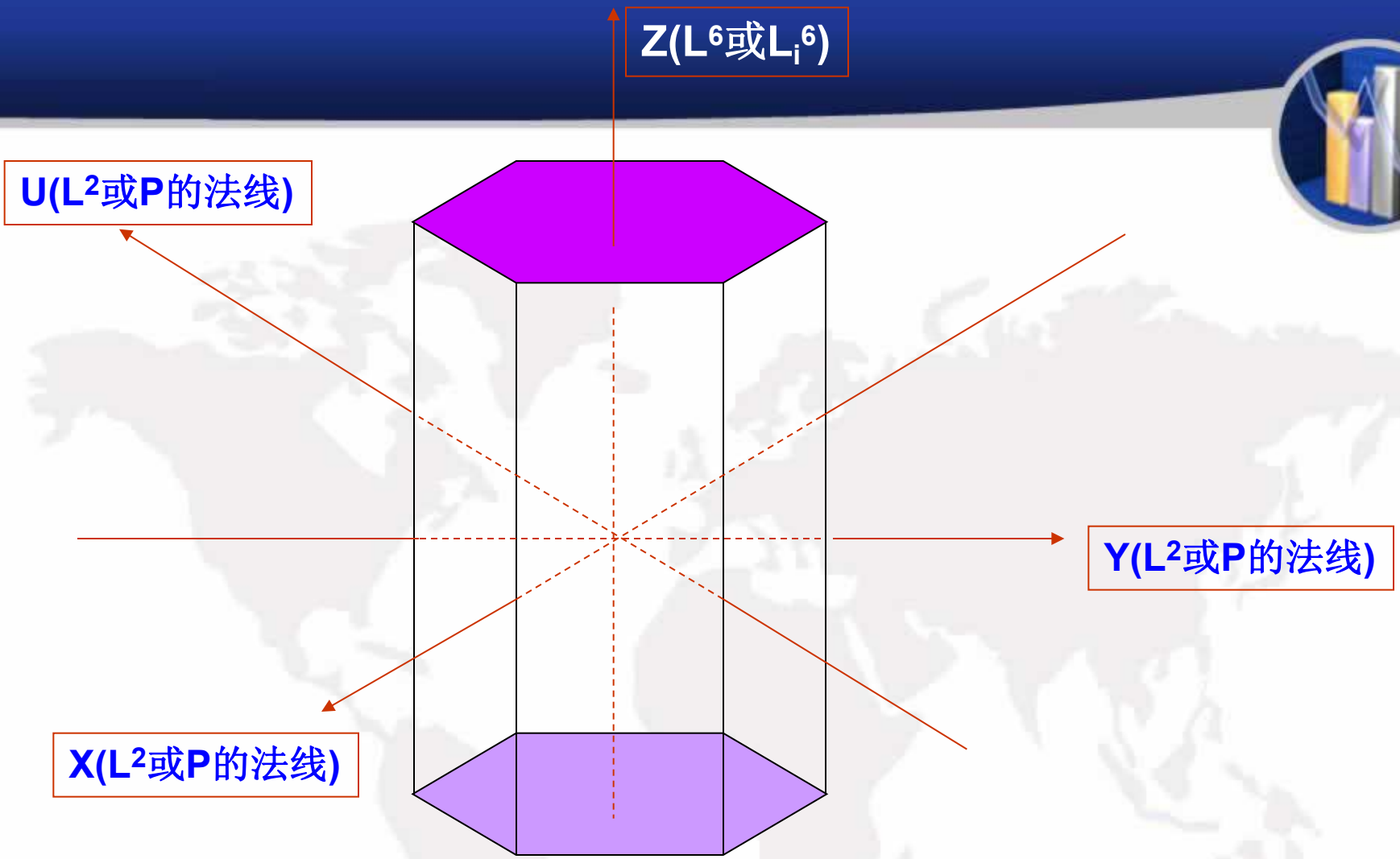
- Z** → 直立，向上为正
- Y** → 左右方向，向右为正
- X** → 左前—右后方向，前为正
- U** → 右前-左后方向，后为正





三方晶系定向原则





$L^3/L^6 \rightarrow Z$ 轴, $3L^2/3P/3$ 晶棱(120° 夹角) $\rightarrow XYU$ 轴

六方晶系定向



六方晶系和三方晶系定向原则表

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	
中级晶族	六方晶系和三方晶系	L ⁶ L ² 、 L ⁶ L ² 7PC、 L ³ L ² 、 L ³ L 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	z轴直立 y轴左右水平	x轴水平朝正前偏左30°， u轴水平朝正后偏左30°。 a=b≠c α=β=90° γ=120°
		L ⁶ P 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		

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 α = β = γ = 90°	
		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	唯一 高次 轴为 直立 的z轴	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		三个互成60°交角的L ² 分别为x轴、y轴和u轴		x轴前后水平， a=b≠c α = β = γ = 90°
		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a轴		x轴前后水平， y轴左右水平。 a≠b≠c α = β = γ = 90°	
		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 α = γ = 90° β > 90°	
		P	P的法线为y轴			
	三斜晶系	L _i 、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 α ≠ β ≠ γ ≠ 90° α > 90°、 > 90° β > 90°	

第二节 晶体常数与晶胞参数



1. 晶体常数与晶胞参数的概念

晶体常数

$a : b : c$ 和
轴角 α 、 β 、 γ 称为晶体常数。

表征
晶体形状

晶胞参数

轴长 a_0 、 b_0 、 c_0 和
轴角 α 、 β 、 γ 称为晶胞参数。

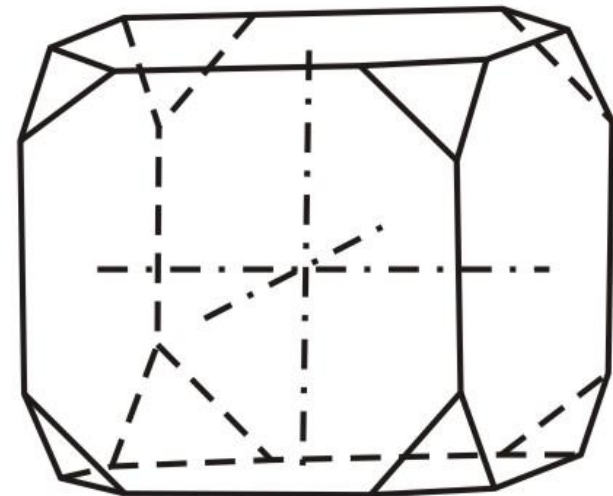
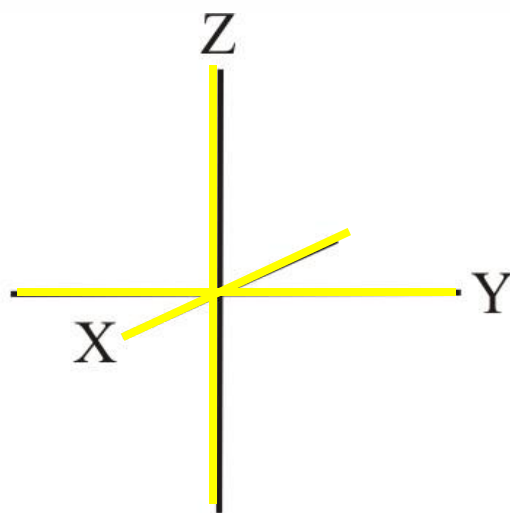
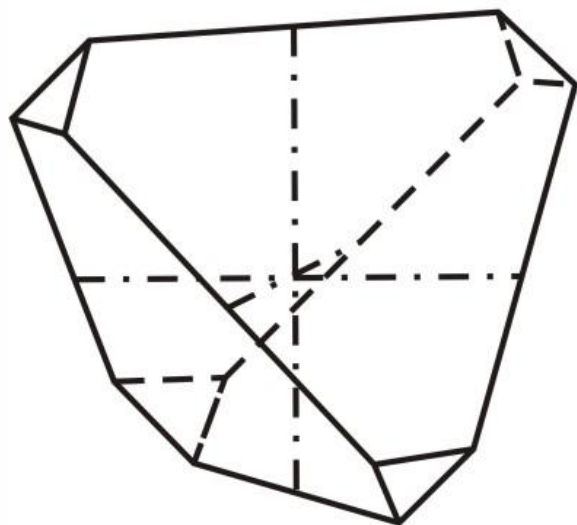
表征
晶体大小

2. 各晶系晶体常数特点



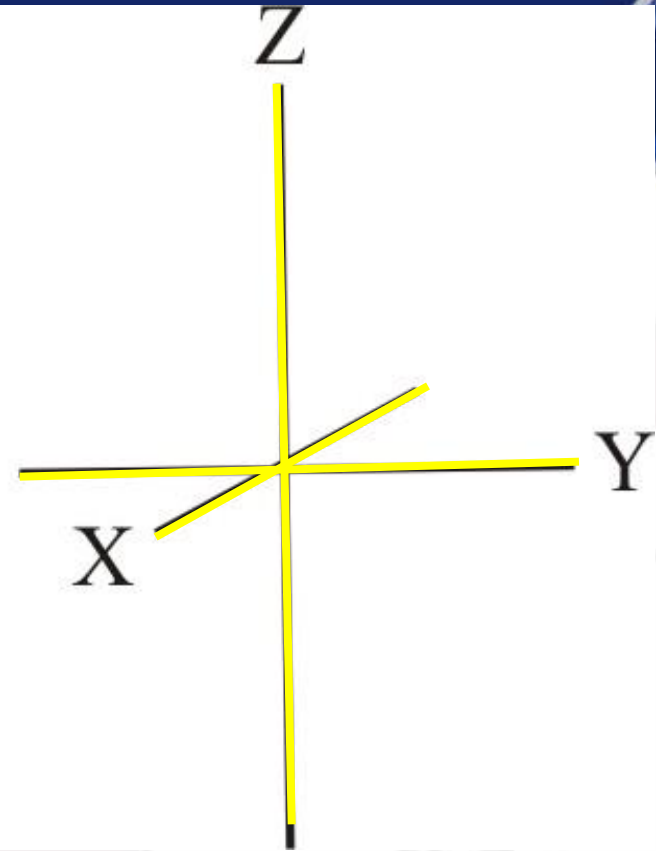
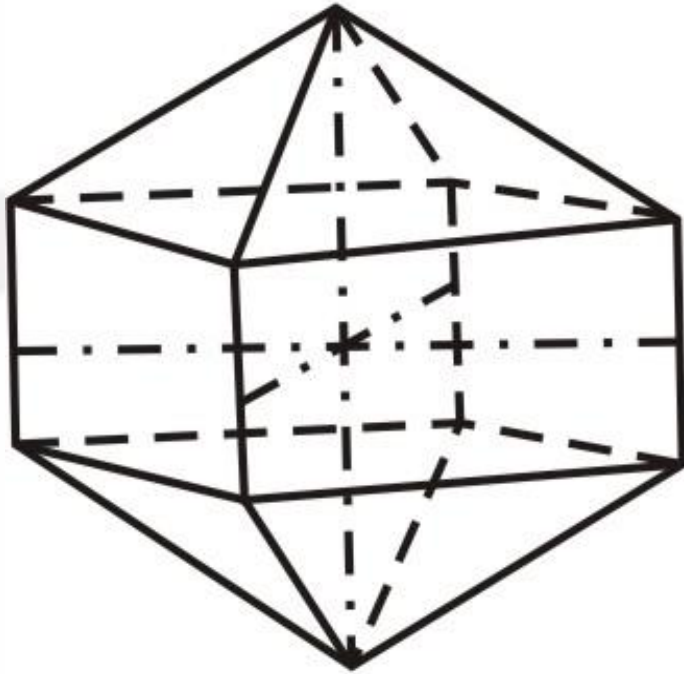
表5-3 各晶系晶体常数特点

晶族	晶系	晶体常数特点
高级晶族	等轴晶系	$a=b=c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ■
中级晶族	四方晶系	$a=b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ■
	六方及三方晶系	$a=b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
低级晶族	斜方晶系	$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
	单斜晶系	$a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta > 90^\circ$
	三斜晶系	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ ■



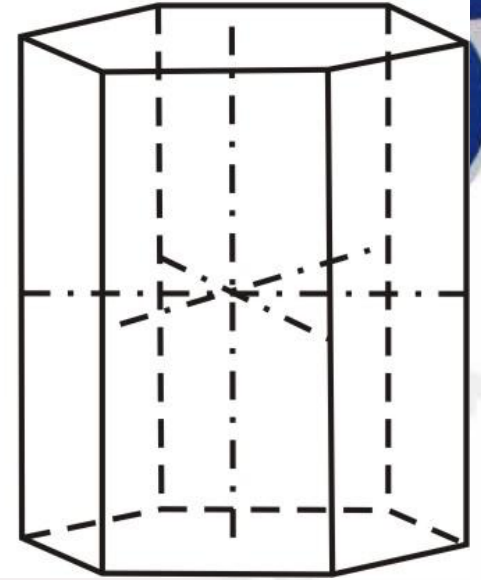
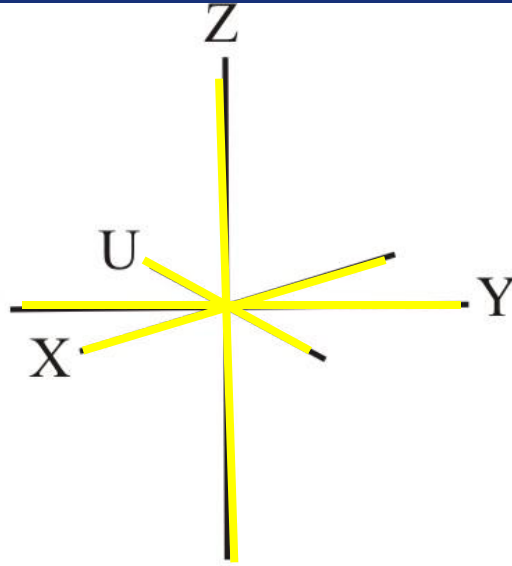
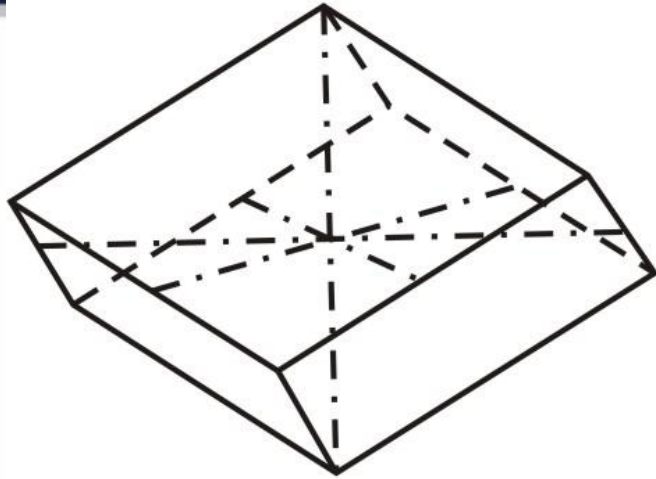
等轴晶系: $a=b=c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

闪锌矿 (左) 方铅矿 (右)



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

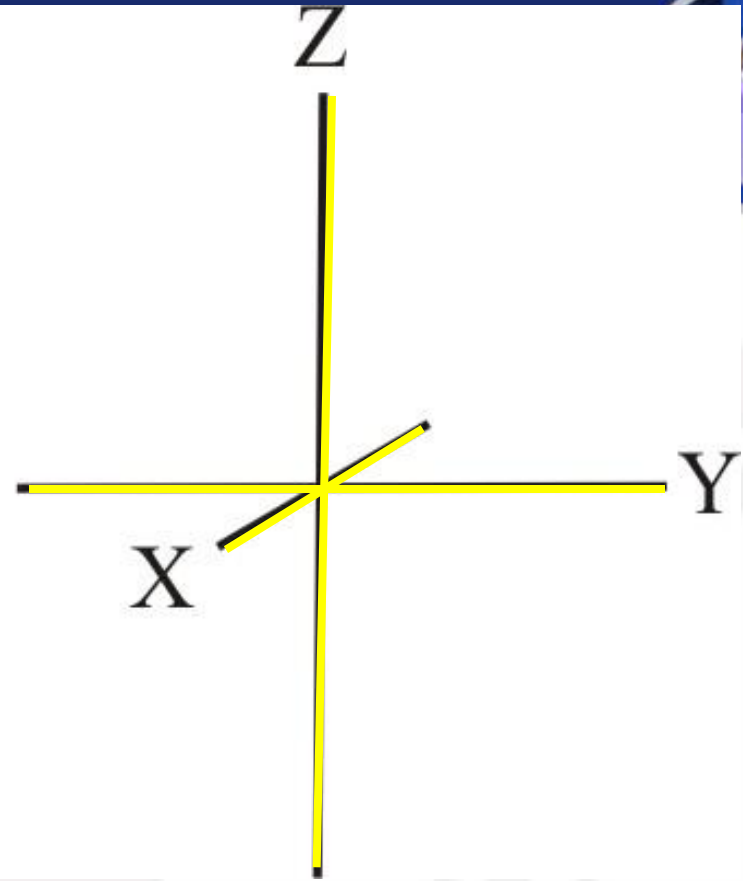
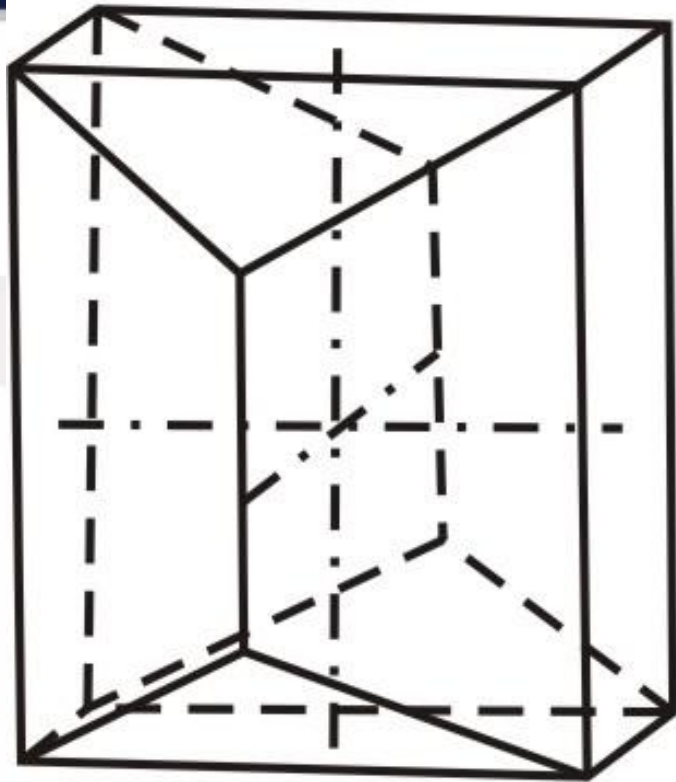
锆石a: c=1: 0.64037



三方及六方晶系: $a=b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$

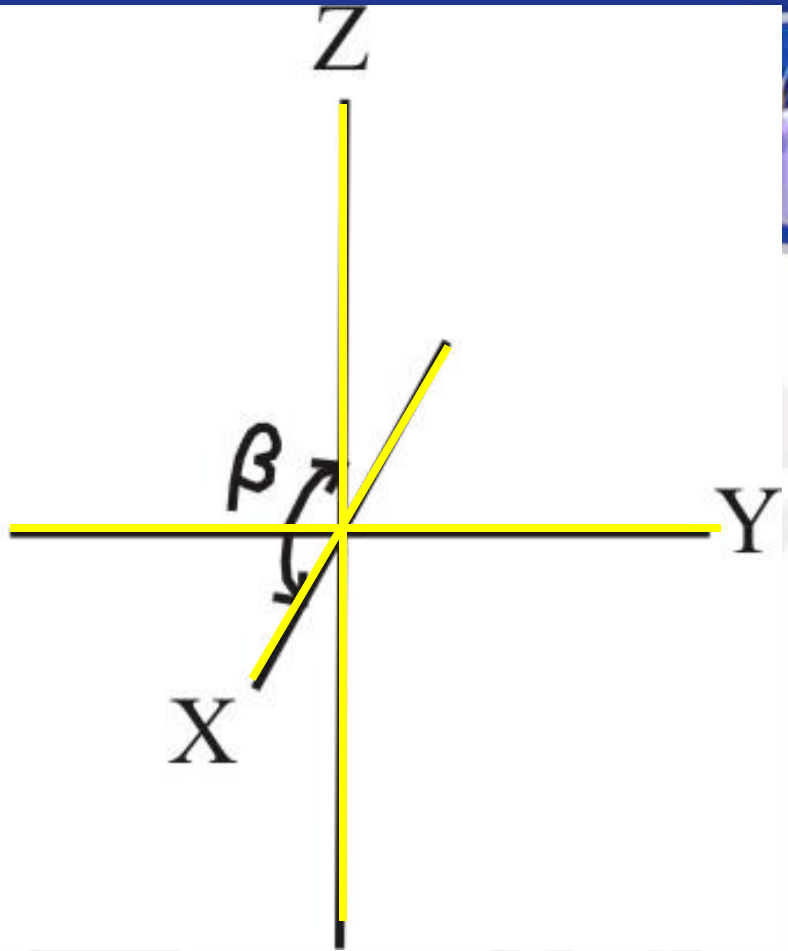
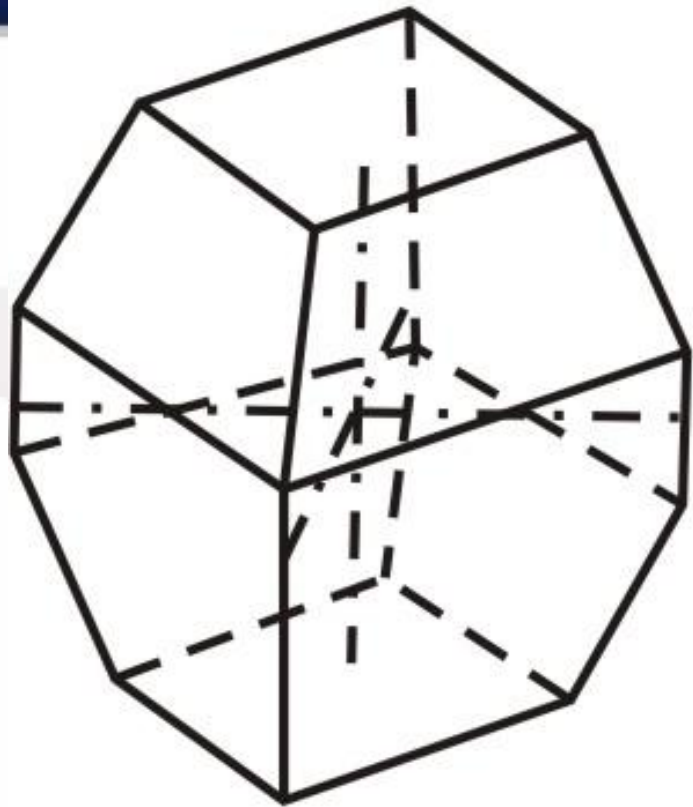
方解石 (三方) (左) $a: c=1: 0.8543$

绿柱石 (六方) (右) $a: c=1: 0.4989$



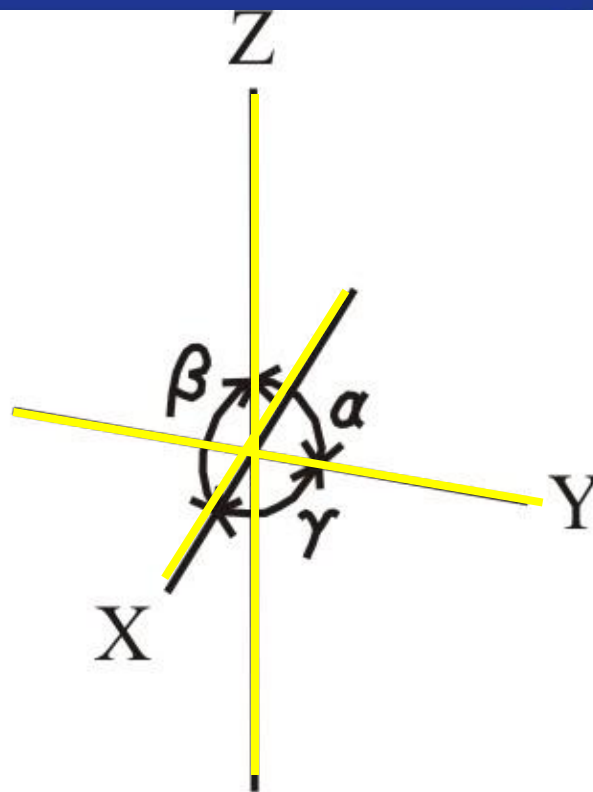
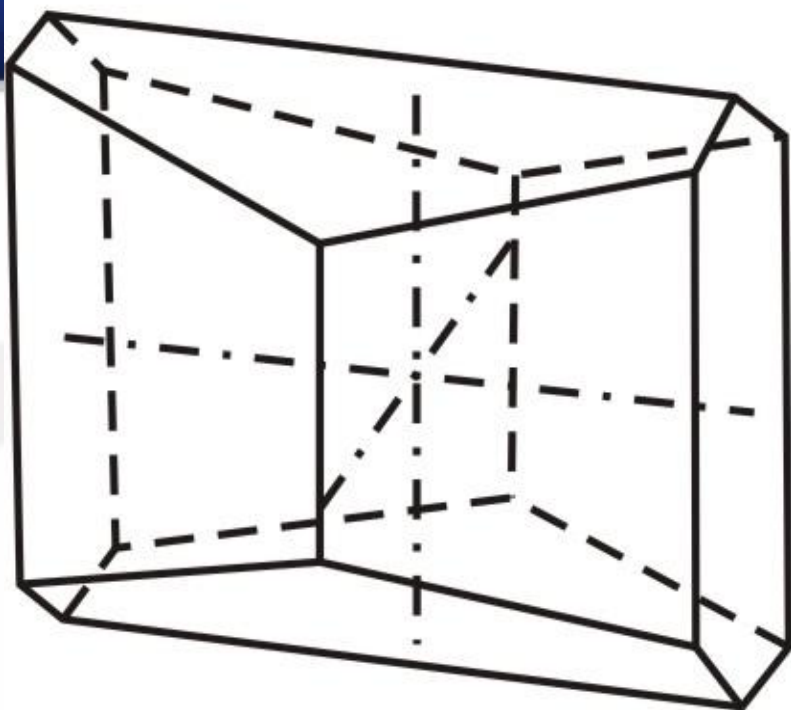
斜方晶系: $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

十字石 $a: b: c = 0.4734: 1: 0.6828$



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

榧石 $a: b: c = 0.7547: 1: 0.8543$ $\beta = 119^\circ 43'$



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

钠长石 $a : b : c = 0.6335 : 1 : 0.5577$

$\alpha = 94^\circ 3'$ $\beta = 116^\circ 29'$ $\gamma = 88^\circ 9'$



等轴晶系 对称程度高，晶轴**X、Y、Z** 为彼此对称的行列，它们通过对称要素的操作可以相互重合，因此它们的轴长是相同的。即 $a=b=c$ ，轴率 $a=b=c=1$

中级晶族（四方、三方、六方晶系）具有一个高次轴，以高次轴为**Z**轴，通过高次轴作用可以使**X**轴与**Y**轴重合，因此轴长 $a=b$ ，与 c 不等，其 $a:c$ 比例视晶体不同而不同。

低级晶族（斜方、单斜、三斜晶系）对称程度低，**X、Y、Z** 轴不能通过对称要素的操作相互重合，所以 $a \neq b \neq c$ ，视晶体不同 $a:b:c$ 比值不同。

第三节 晶面符号



(1) 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。

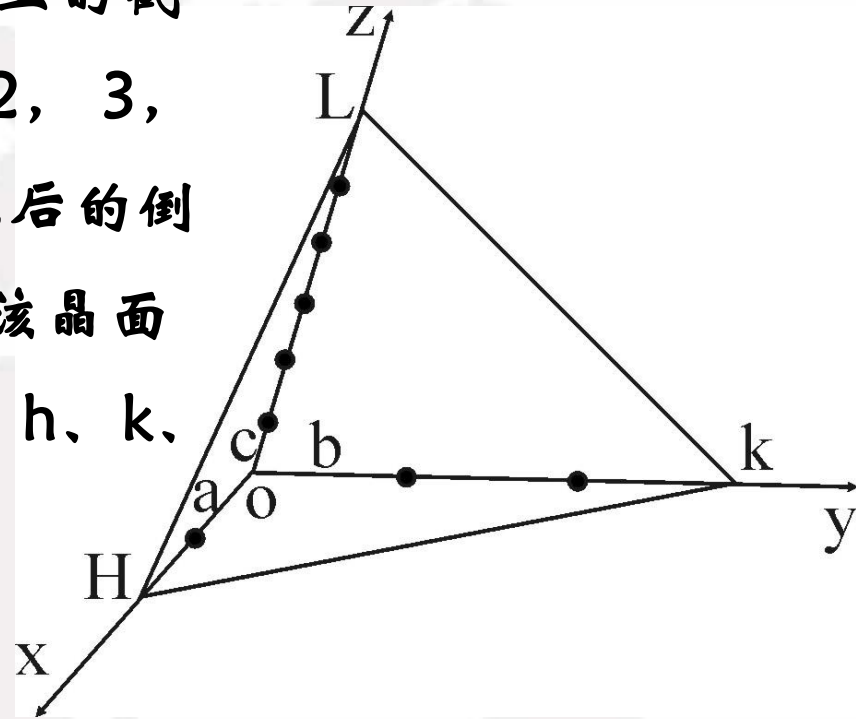
国际上常用的是米氏符号：晶面在三根晶轴上的截距系数的倒数比，用小括号括起来。

如果晶面相交于晶轴的负端，则在该相应指数上加“-”。



(2) 三轴坐标系中晶面符号的构成

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, 通常用**(hkl)**表示, h , k , l 叫晶面指数。

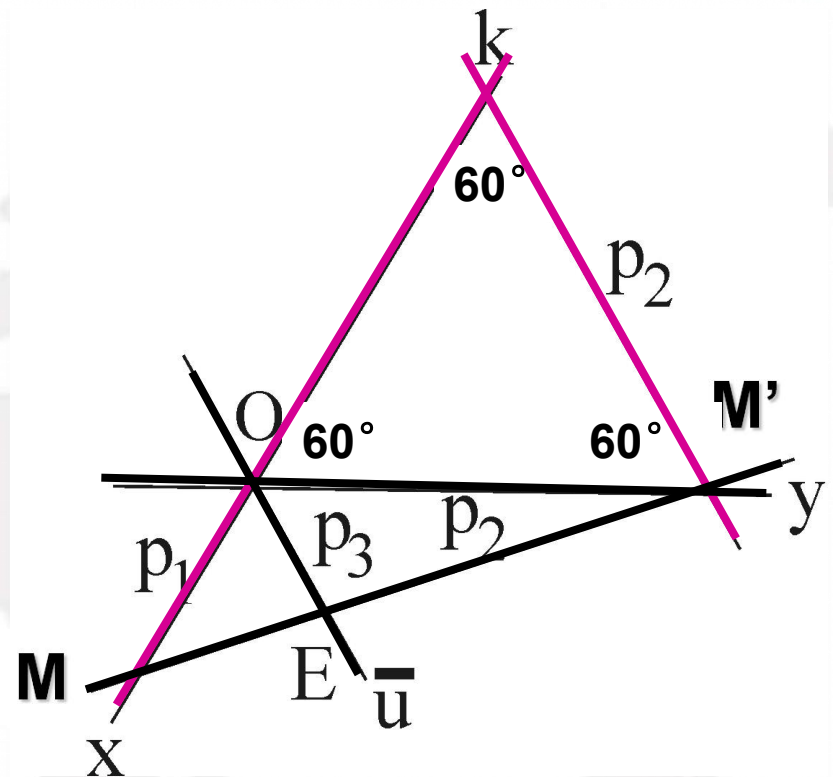


注意: 三个晶轴上的轴单位不一定相等, 所以, 截距系数与截距不一定成正比。



(3) 四轴坐标系中晶面符号的构成

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 、 i 、 l ，晶面符号为 $(hkil)$ ，排列顺序为 X 、 Y 、 U 、 Z ，前面三个指数的代数和等于0，即 $h + k + i = 0$ 。例如： (1120) (1011) 等。





证明前面三个指数的代数数和等于0

即： $h+k+i=0$

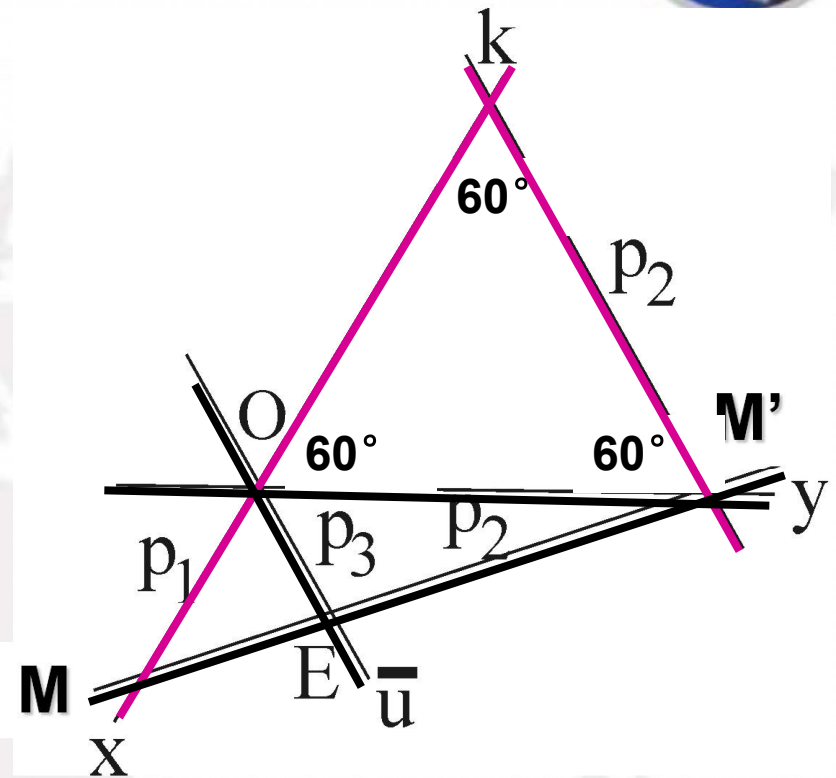
设一晶面MM'在X、Y、U轴上的截距分别为 P_1 、 P_2 、 P_3 ，作辅助线KM'，使其平行于U轴，OKM'为等边三角形，三个边都等于 P_2 。

由于 $\triangle MKM'$ 与 $\triangle MOE$ 相似，因此： $\frac{P_1+P_2}{P_2} = \frac{P_1}{P_3}$ ，以 P_1 除以等

式两边： $\frac{P_1+P_2}{P_2 P_1} = \frac{P_1}{P_1 P_3}$ ，

即： $\frac{1}{P_2} + \frac{1}{P_1} = \frac{1}{P_3}$

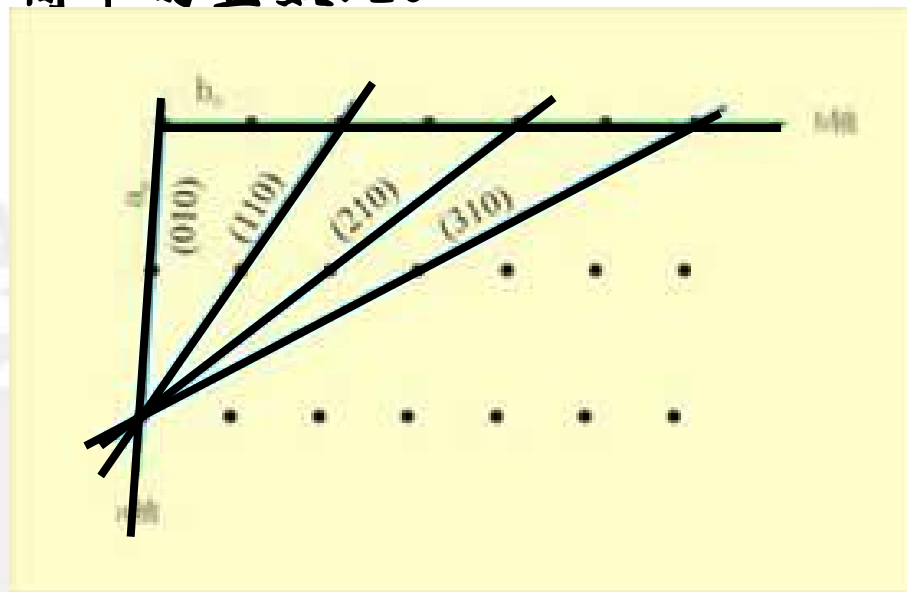
因此， $h+k+\bar{l}=0$





(4) 整数定律

晶面在轴上截距系数之比为简单的整数比。



晶面是面网，晶轴是行列，晶面截晶轴于结点。以晶轴轴单位长 a 、 b 、 c 作为度量单位，则晶面在晶轴上截距的系数比为简单整数比。



整数定律：晶面指数为简单整数。为什么？

面网密度越大，晶面在晶轴上截距的系数比越简单；晶体被面网密度大的晶面所包围（布拉维法则），因此晶面在晶轴上截距的系数比为简单整数比。实际晶体上的晶面就是晶面指数简单的晶面。



在晶体模型上怎么写晶面符号?因为我们并不知道晶面截晶轴的截距系数,但我们可以知道截距大小相对关系.

八面体 (111)、四方双锥 (hhl)



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



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



晶面指数的含义

1. 晶面指数有正负之分 ($h k l$)
2. 晶面与结晶轴平行时，相应的晶面指数为0
3. 晶面指数的绝对值越大，表示晶面在相应结晶轴上的截距系数值（绝对值）越小
4. 同一晶体中，晶面指数的绝对值全部相等，而正、负号恰好全部相反的两晶面必相互平行



注意:

1. 晶棱符号也有正、负之分
2. 绝对值相同，对应指数符号彼此相反的晶棱符号，表示同一晶棱, 如 $[102]$ 与 $[\bar{1}02]$
3. 在直角坐标系中，指数为0表示晶棱垂直于对应的晶轴。

第四节 晶棱符号



(1) 晶棱符号:

为表征晶棱（直线）方向的符号，它不涉及晶棱的具体位置，所有**平行棱只有一个晶棱符号**。

确定晶棱符号的方法是：将晶棱（或其他直线）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：

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

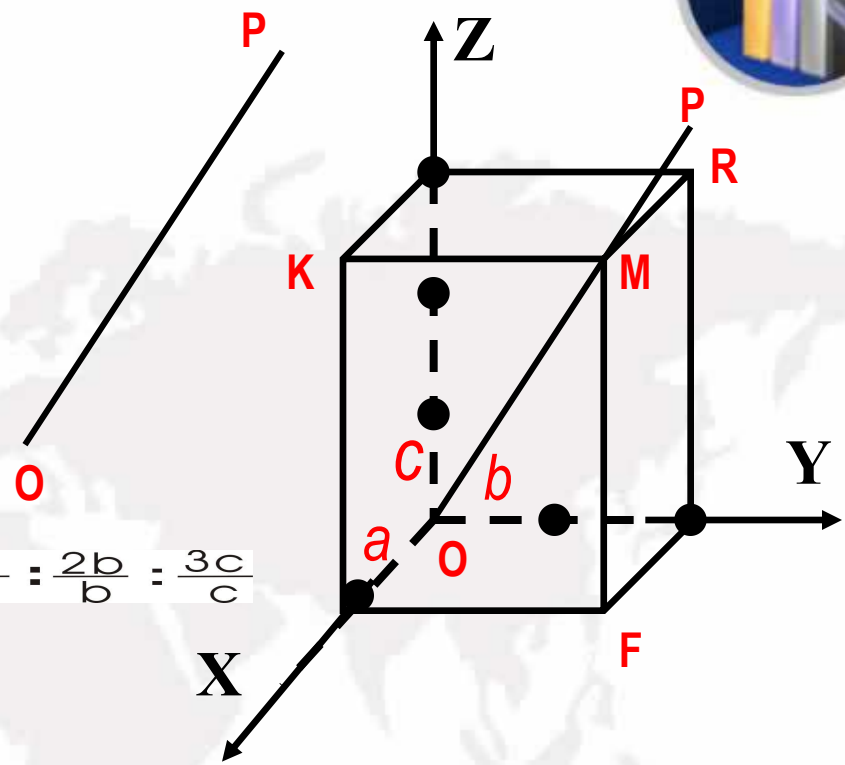
晶棱符号采用方括号表示“[]”，写作：**[rst]**



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。

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



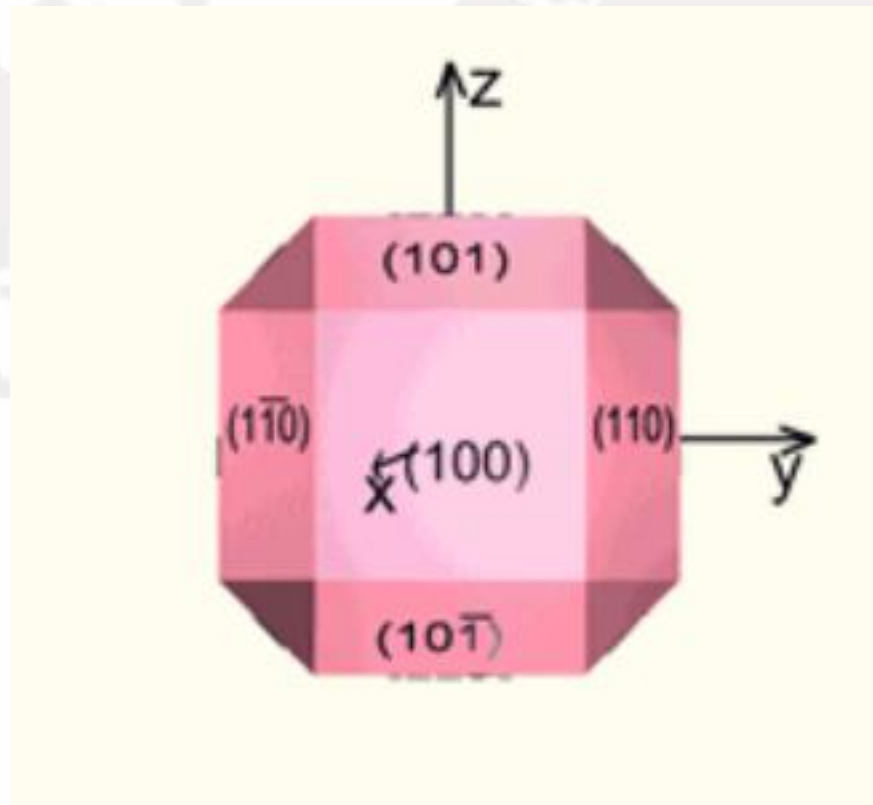
则 故该晶棱的符号为[123].

第五节 晶带符号



(2) 晶带的概念

交棱相互平行的一组晶面的组合就叫晶带。





由布拉维法则可知，晶体被面网密度大的晶面所包围，所以实际晶体晶面是有限的；相应的，**晶面交棱也是密度较大的行列**，这种行列方向也是不多的，所以晶体上许多晶棱具有共同的方向，相互平行。

晶带轴： 一组晶面交棱相互平行，组成一个晶带。平行于此组平行晶棱，通过晶体中心的直线叫做该晶带的**晶带轴**。

该组**晶棱的符号就是晶带轴**的符号，用[]表示。



晶带定律：晶体上任一晶面至少属于两个晶带。即任意两晶棱(晶带)相交可决定一个可能晶面，任意两晶面相交可决定一个可能晶棱(晶带)。

