

第四章 晶体定向与晶体符号



目 录

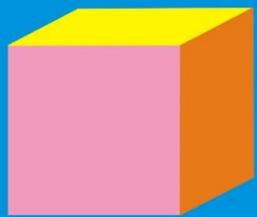


一 晶体的定向

二 晶体坐标系的选择

三 晶体符号

为何要进行晶体定向



$3L^4L^36L^29PC$



$3L^4L^36L^29PC$



$3L^4L^36L^29PC$

- ✿ 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

第一节 晶体坐标系的选择



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，使晶体中各种几何要素得到相应的空间取向。

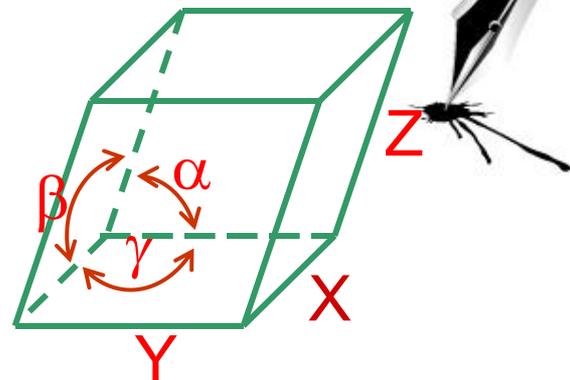
- 选定坐标轴（晶轴）和确定个轴单位长（轴单位）的比率（轴率）

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

→ 决定形状

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

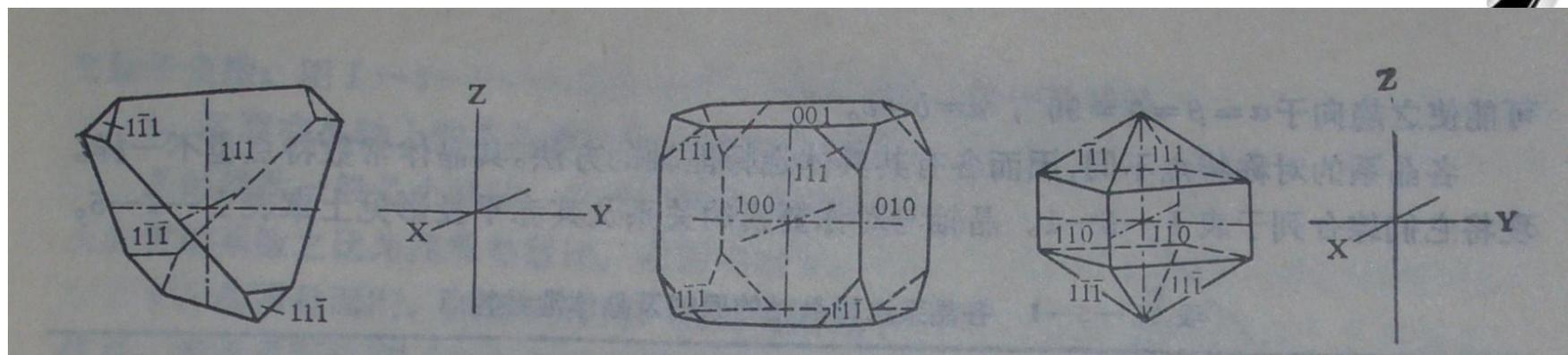


等轴晶系 对称程度高，晶轴X、Y、Z 为彼此对称的行列，它们通过对称要素的操作可以相互重合，因此它们的轴长是相同的。即 $a=b=c$ ，轴率 $a=b=c=1$

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。

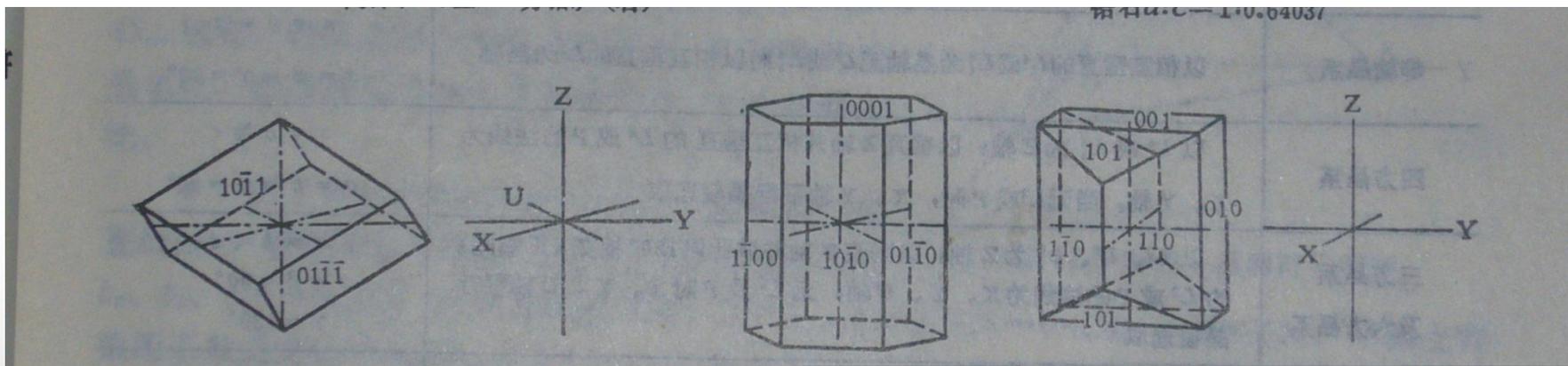
低级晶族（斜方、单斜、三斜晶系）对称程度低，X、Y、Z 轴不能通过对称要素的操作相互重合，所以 $a \neq b \neq c$ ，视晶体不同 $a:b:c$ 比值不同。

2.各晶系晶体常数特点



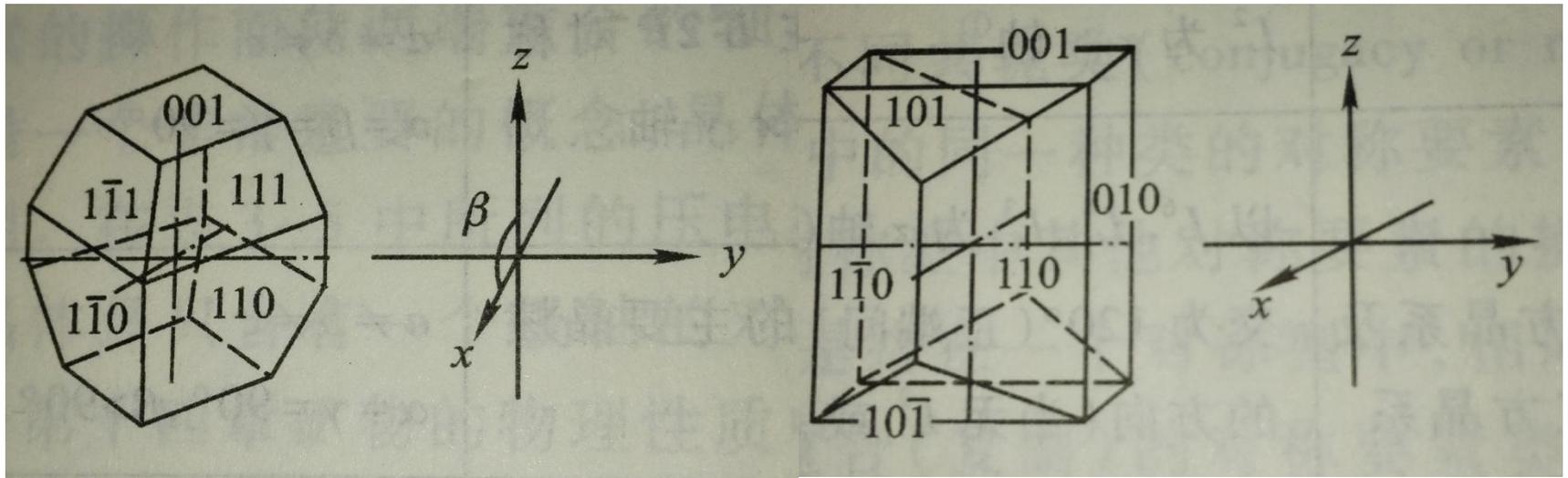
等轴晶系 $a=b=c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

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



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

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



单斜晶系 $a \neq b \neq c$

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

三斜晶系 $a \neq b \neq c$

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



二、晶体定向的原则

1、晶轴的选择

- ★ 应当符合晶体所固有的对称性

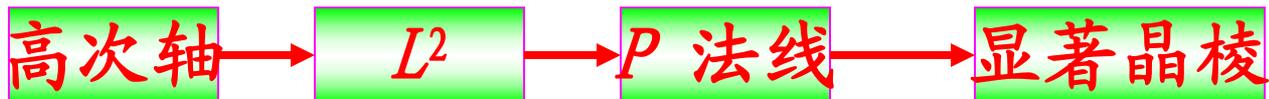
对称轴

→ 对称面的法线

→ 平行晶棱

- ★ 尽可能使 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ, a=b=c$

2、步骤



三、各晶系晶体定向的方法



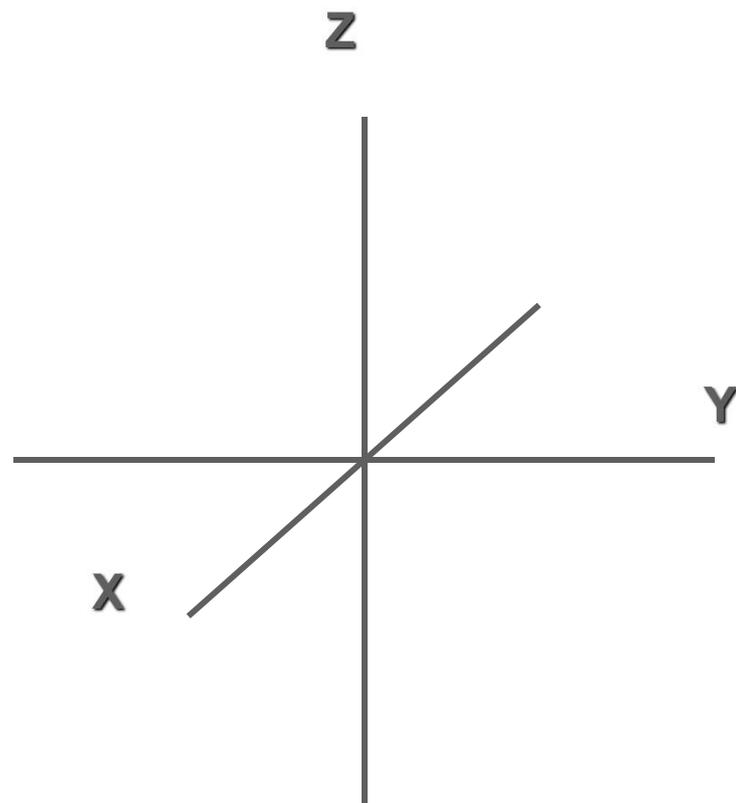
● 晶体的三轴定向

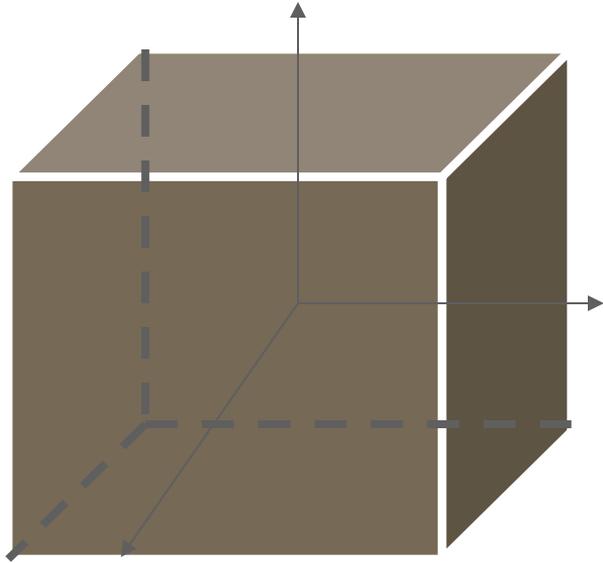
适用于等轴晶系、四方晶系、斜方晶系、单斜晶系、
三斜晶系。

Z → 直立，向上为正

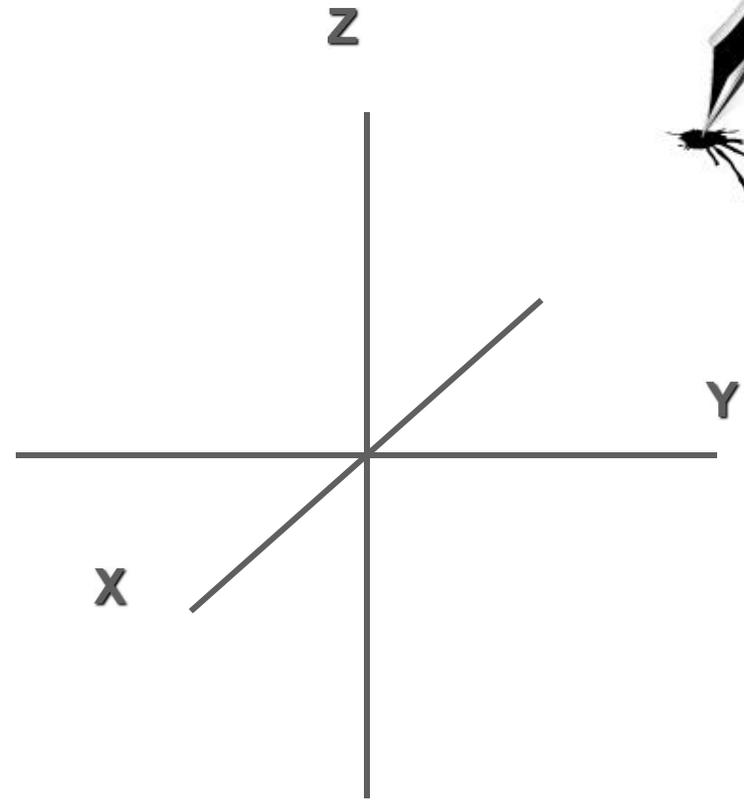
Y → 左右方向，向右为正

X → 前后方向，向前为正



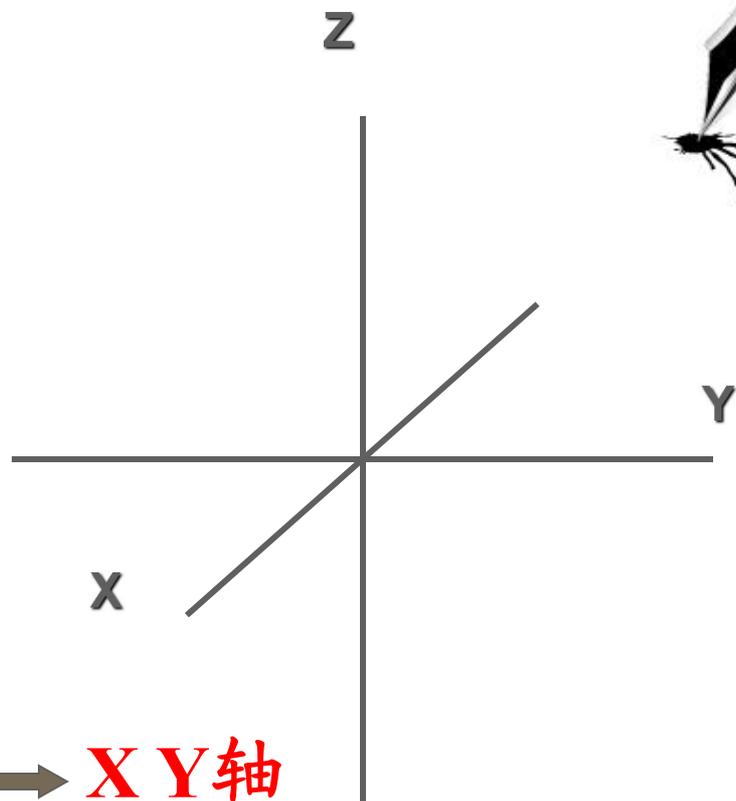
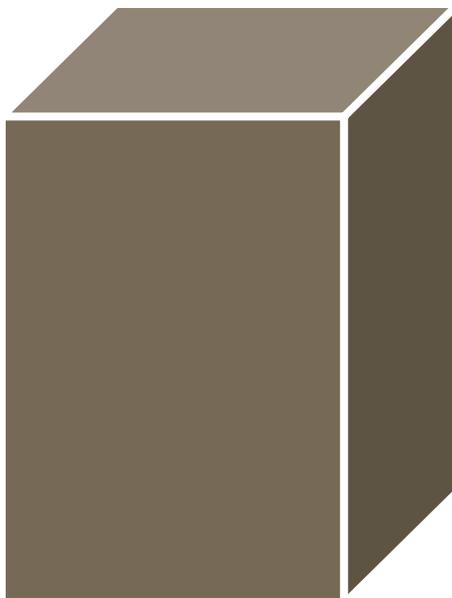


$3L^4/3L^2 / 3L_i^4 \longrightarrow X Y Z$ 轴



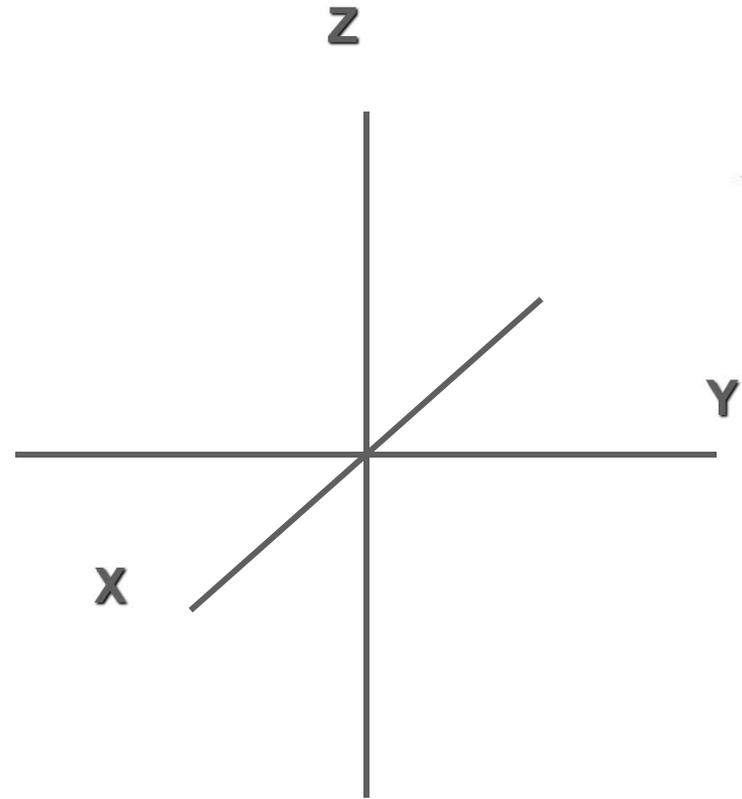
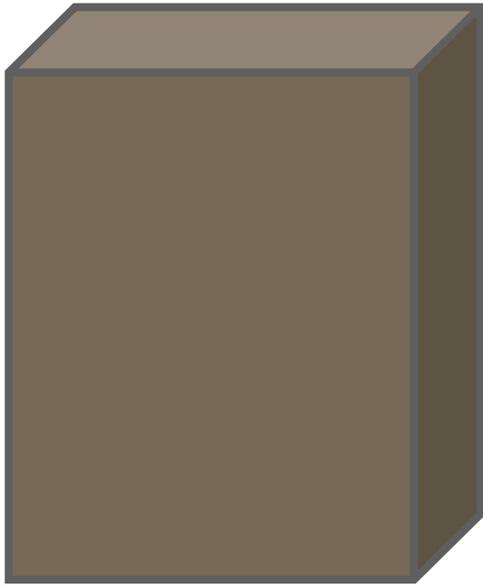
等轴晶系 $a=b=c$

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



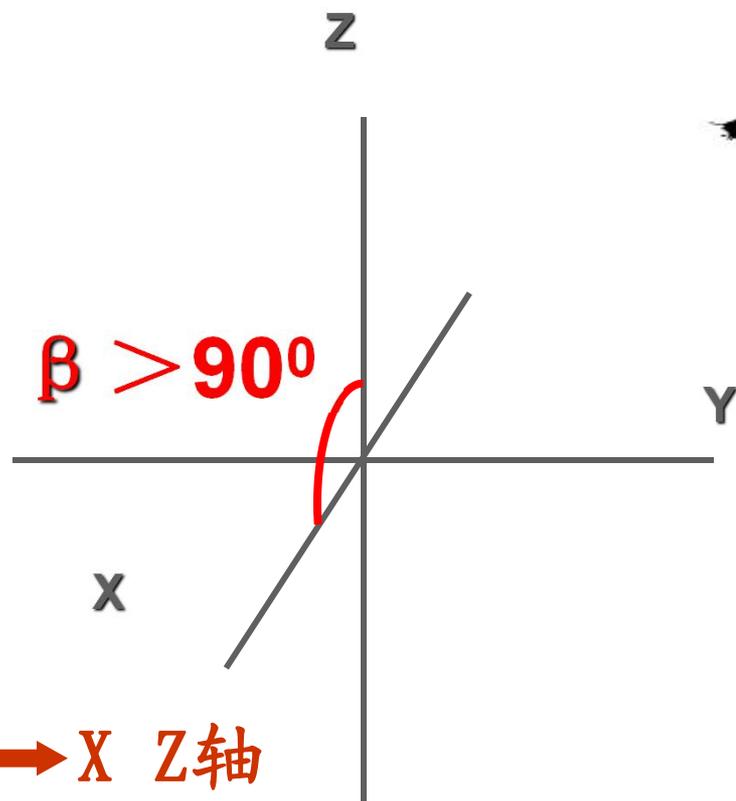
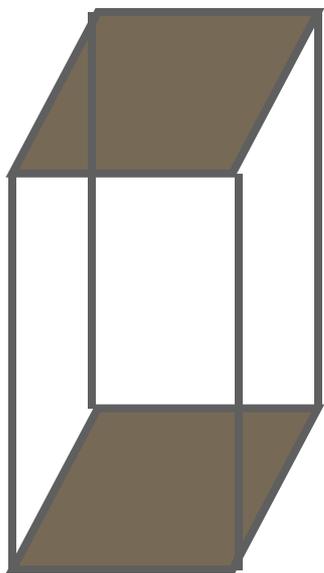
$1L^4 \rightarrow Z$ 轴 $2L^2_{\perp} / 2P_{\perp} / 2$ 晶棱 $_{\perp} \rightarrow XY$ 轴

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



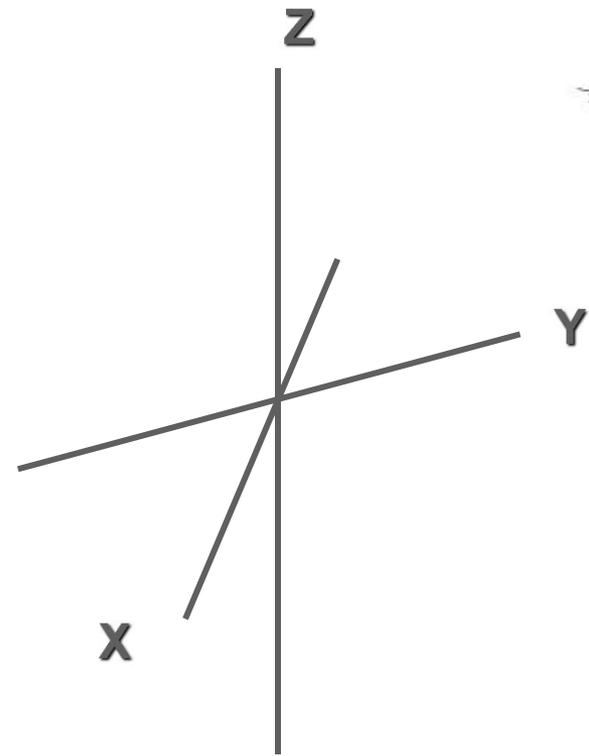
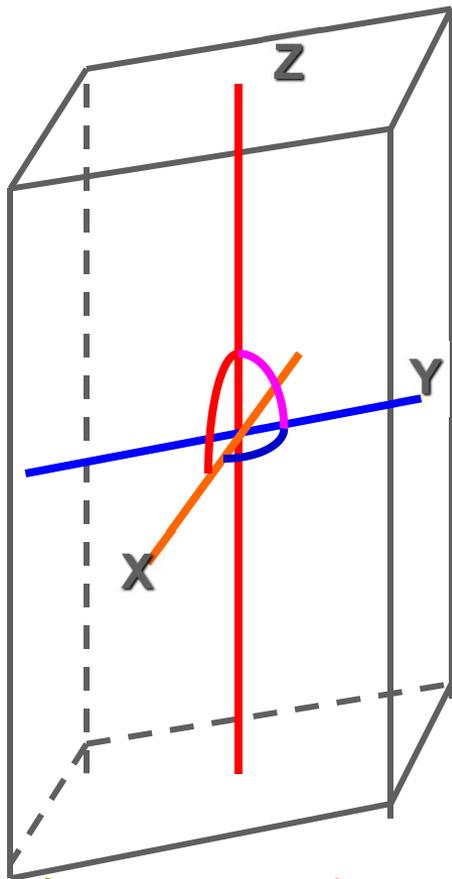
$3L^2/3P \rightarrow X Y Z$ 轴

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



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

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



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 $a \neq b \neq c$

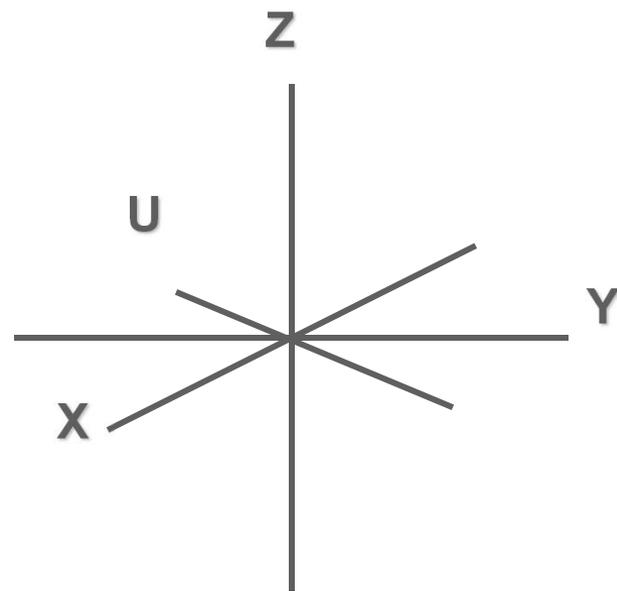
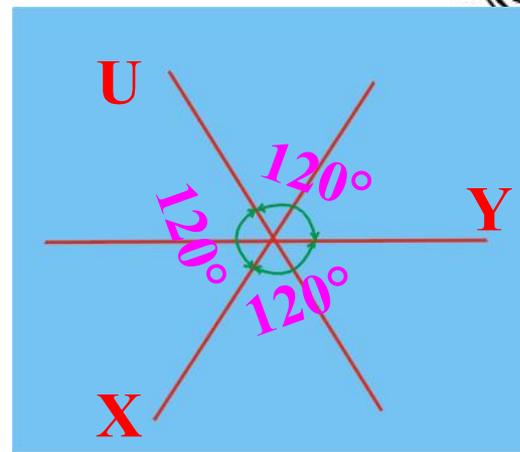
$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

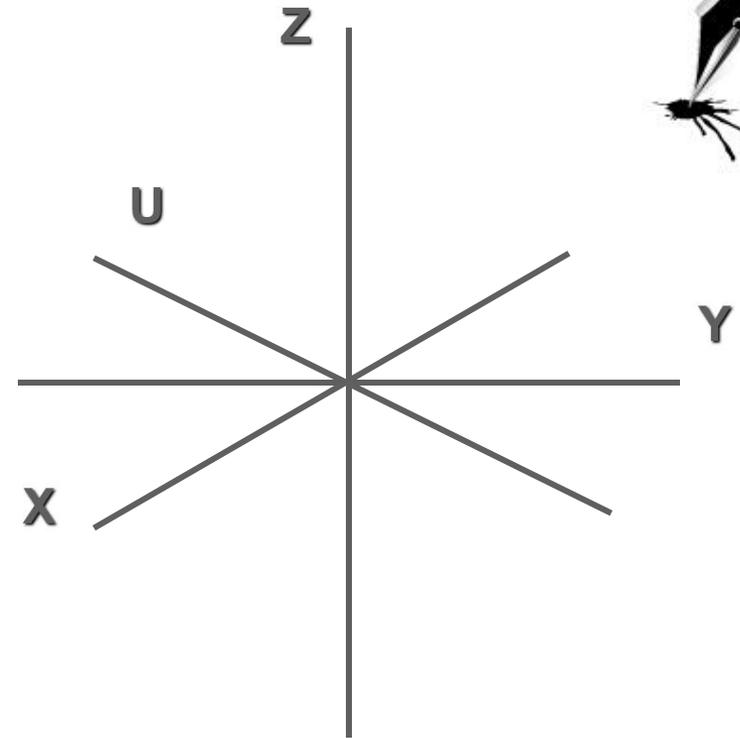
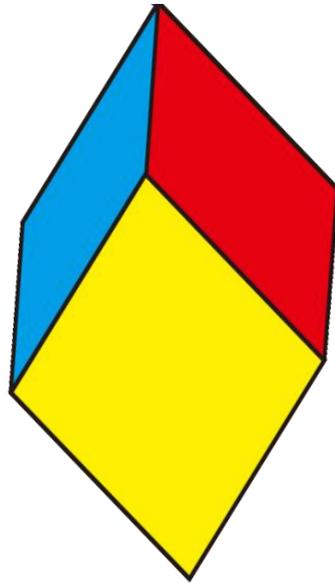
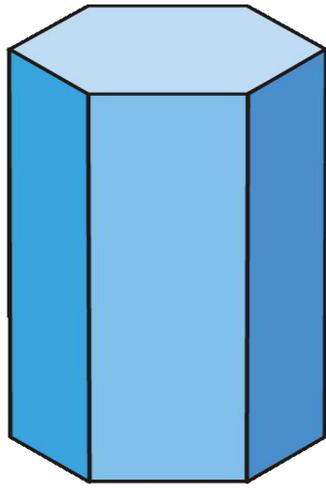
三、各晶系晶体定向的方法

● 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—右后方向，前为正
- U** → 右前—左后方向，后为正





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

L^3/L^6 \longrightarrow Z轴, $3L^2/3P/3$ 晶棱(120° 夹角) \longrightarrow X Y U轴

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	$3L^24L^3$, $3L^24L^33PC$	三个互相垂直的 L^2 分别为 a 、 b 、 c 轴		c 轴直立	a 轴前后水平, b 轴左右水平, c 轴直立; $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
		$3L_4^44L^36P$	三个互相垂直的 L_4^4 分别为 a 、 b 、 c 轴			
		$3L^44L^36L^2$, $3L^44L^36L^29PC$	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^4PC L^44P $L^44L^2, L_4^42L^22P,$ L^44L^25PC	唯一高次轴为直立的 c 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	a 轴前后水平, $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
				两个相互垂直的 P 的法线分别为 a 轴和 b 轴		
				两个互相垂直的 L^2 分别为 a 轴和 b 轴		
	三方晶系	$L^66L^2, L^66L^27PC,$ L^33L^2, L^33L^23PC $L^66P, L_4^63L^23P, L^33P$ L^6, L_4^6, L^6PC L^3, L^3C	三个互成 60° 交角的 L^2 分别为 a 轴、 b 轴和 u 轴	三个互成 60° 交角的 P 的法线分别为 a 轴、 b 轴和 u 轴	b 轴左右水平	a 轴水平朝正前偏左 30° , u 轴水平朝正后偏左 30° ; $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$
三个均垂直于 c 轴且本身间互成 60° 交角的适当晶棱方向分别为 a 轴、 b 轴和 u 轴						



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	$3L^2, 3L^2 3PC$	三个互相垂直的 L^2 分别为 c 轴、 b 轴和 a 轴		a 轴前后水平, b 轴左右水平; $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
		$L^2 2P$	L^2 为 c 轴, 两个互相垂直的 P 的法线分别为 b 轴和 a 轴			
	单斜晶系	$L^2, L^2 PC$	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			
三斜晶系	L^1, C		三个适当的晶棱方向为 c 轴、 b 轴和 a 轴		b 轴左右、朝右下方倾, a 轴大致前后、朝前下方倾; $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ $\alpha > 90^\circ, \beta > 90^\circ, \gamma > 90^\circ$	



四、晶体符号：

◆ 晶面符号

◆ 晶棱符号

◆ 晶带轴和晶带定律

1、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。

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。

(2) 晶面符号的构成

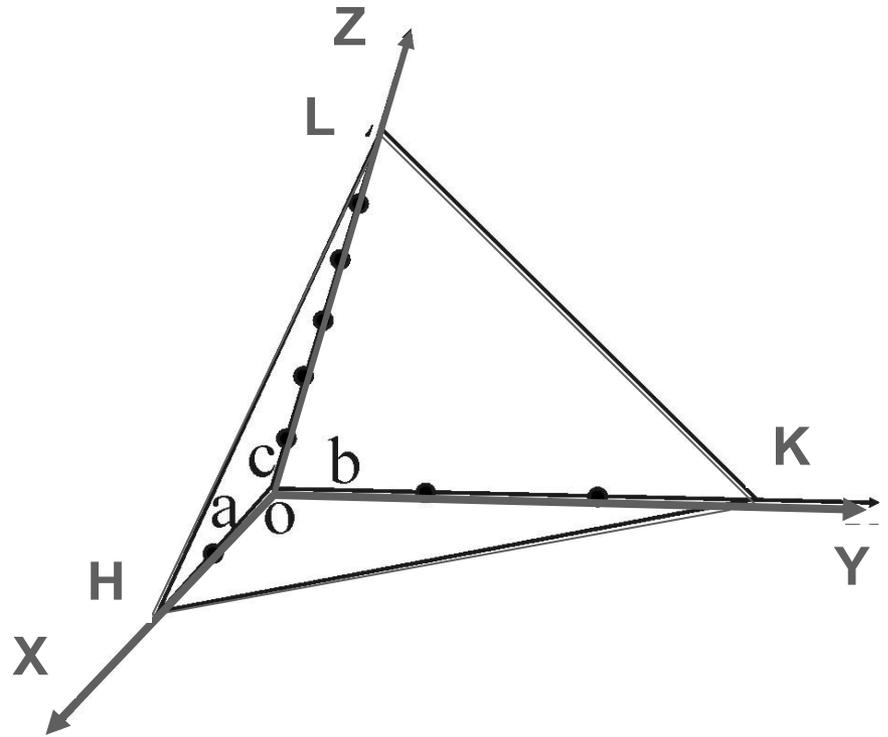
其一般表达形式为 (hkl) 或 $(h\bar{k}l)$ ， h 、 k 、 l 叫晶面指数。

(3) 三轴定向晶体晶面指数的确定

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。

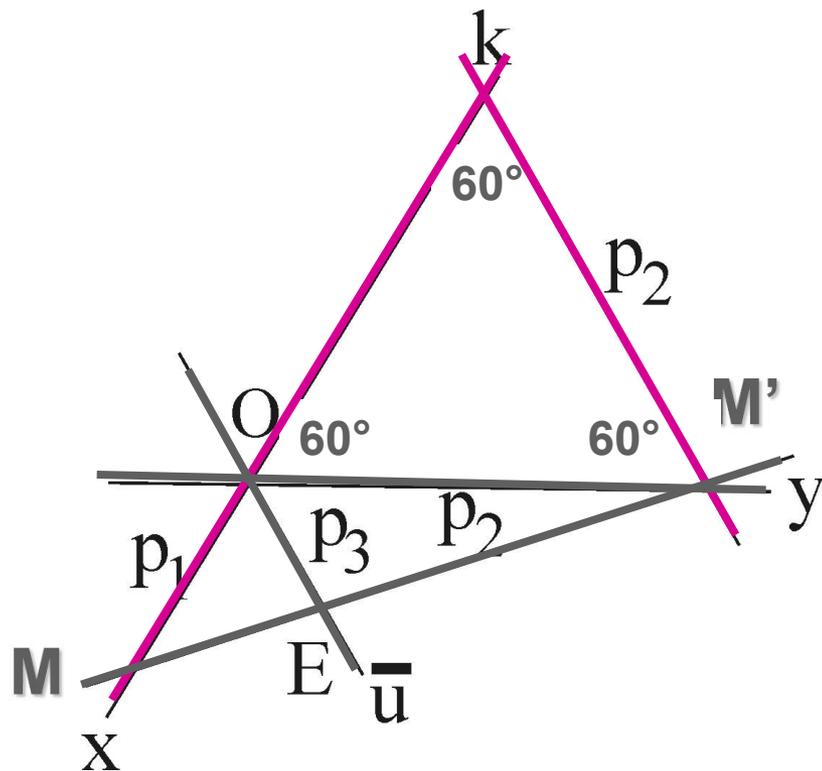
注意: 三个晶轴上的轴单位不一定相等, 所以, 截距系数与截距不一定成正比。



(4) 四轴定向晶体晶面指数的确定

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。

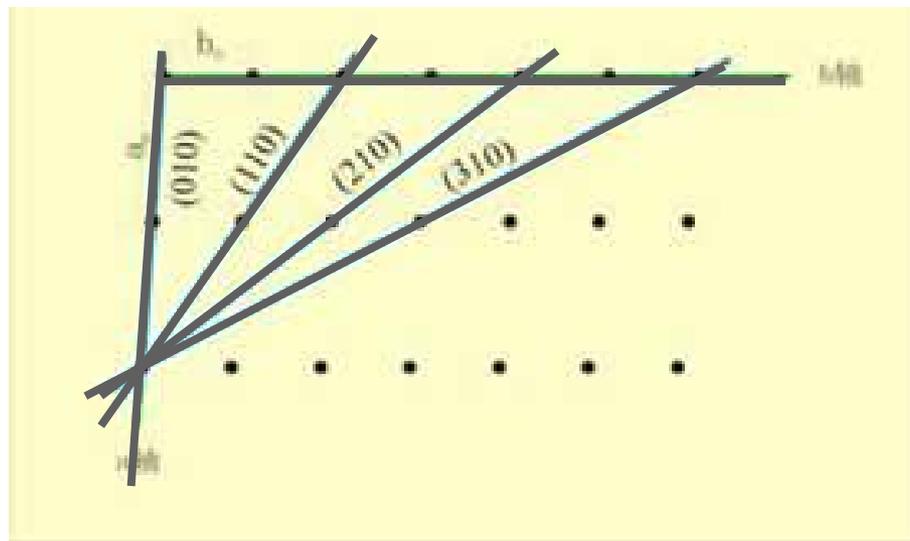
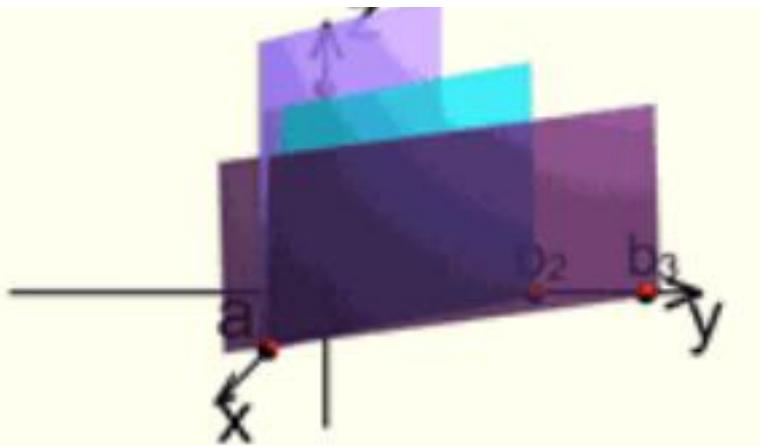




(5) 晶面指数的含义

- ⊕ 晶面符号中指数为零时，表明该晶面与相应的结晶轴平行： $h=0$ ，晶面平行于X轴； $k=0$ ，晶体平行于Y轴； $l=0$ ，晶体平行于Z轴。
- ⊕ 因晶面指数是从截距系数的倒数比获得的，所以当轴单位相等时，晶面指数越大，在晶轴上的截距越小。
- ⊕ 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。
- ⊕ 如果晶面相交于晶轴的负端，则在该相应指数上加“—”。

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。

2、晶棱符号



(1) 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。

(2) 晶棱符号的构成

晶棱符号采用方括号表示 “[]”，写作： $[rst]$

(3) 三轴定向晶体晶棱指数的确定



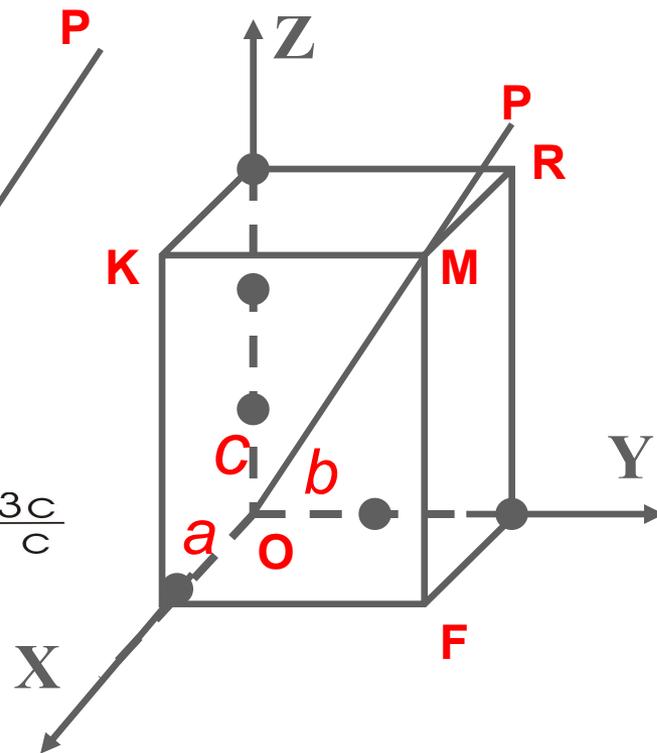
确定晶棱符号的方法是：将晶棱（或其他直线）移至经过晶体中心（即坐标原点），然后在直线上任取一点，求出该点在三轴上的坐标（**x、y、z**），以轴长来度量，即可求得晶棱符号

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

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。

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



则 故该晶棱的符号为[123].

(4) 晶棱指数的含义



- ⊕ 晶棱指数中，若某一数值的符号为负，则表示晶棱垂足对应晶轴的负端；
- ⊕ 若两个晶棱的晶棱指数绝对值相同，而符号相反，则表示这两个晶棱为同一晶棱，即一条晶棱可用两种符号表示；
- ⊕ 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；

3、晶带轴和晶带定律



(1) 晶带的定义：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。



(2) 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，但必须连以“晶带”一词。

(3) 晶带定律

定义：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的晶棱(晶带)。

根据晶带定律，我们可以由若干已知的晶面或晶带推导出晶体上一切可能的晶面位置。

晶带定律和整数定律分别以不同的形式阐述了晶面（面网）与晶棱（行列）相互依存的几何关系，为研究晶体几何形态指明了方向。

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。

