

第四章 晶体定向与晶体符号

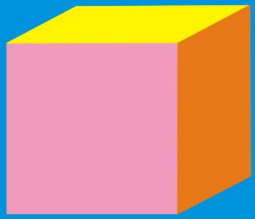
- 一 晶体坐标系的选择
- 二 晶体常数与晶胞参数
- 三 晶面符号



陕西國際商貿學院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

为何要进行晶体定向



$3L^44L^36L^29PC$



$3L^44L^36L^29PC$



$3L^44L^36L^29PC$

- ✿ 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



陕西国际商贸学院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

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）

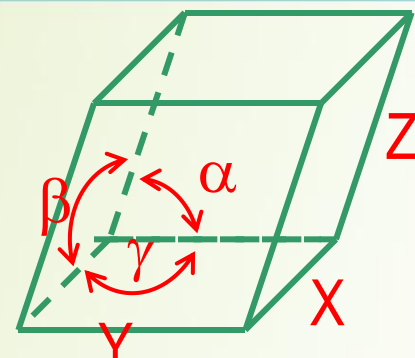


晶轴 交于晶体中心的三条或四条直线
分别表示为X Y Z或X Y U Z

轴角 各晶轴之间的夹角

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

轴率 各晶轴上的轴单位之比 $a:b:c$



$$Y \wedge Z = \alpha$$

$$X \wedge Z = \beta$$

$$X \wedge Y = \gamma$$

决定形状

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

晶体常数 轴率 $a:b:c$ 和轴角 α, β, γ



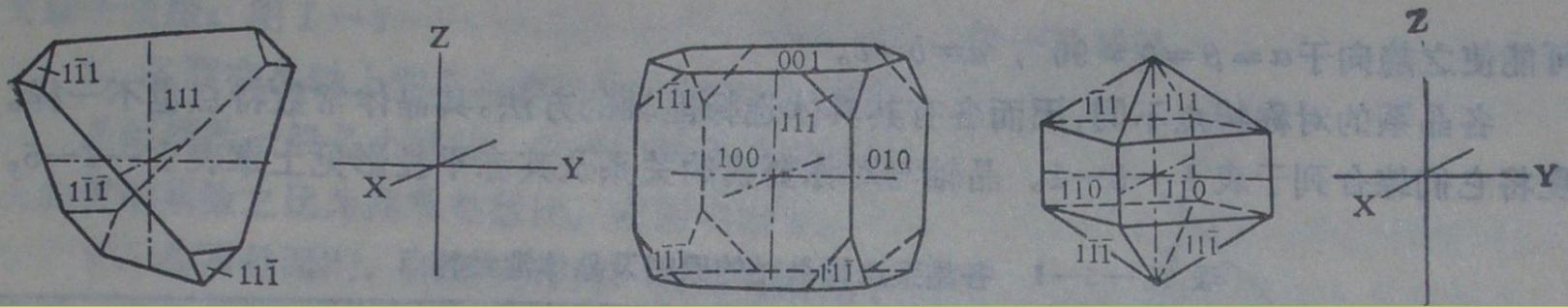
晶胞参数 轴单位 a_0, b_0, c_0 和轴角 α, β, γ \longrightarrow 决定形状和大小



陕西国际商贸学院

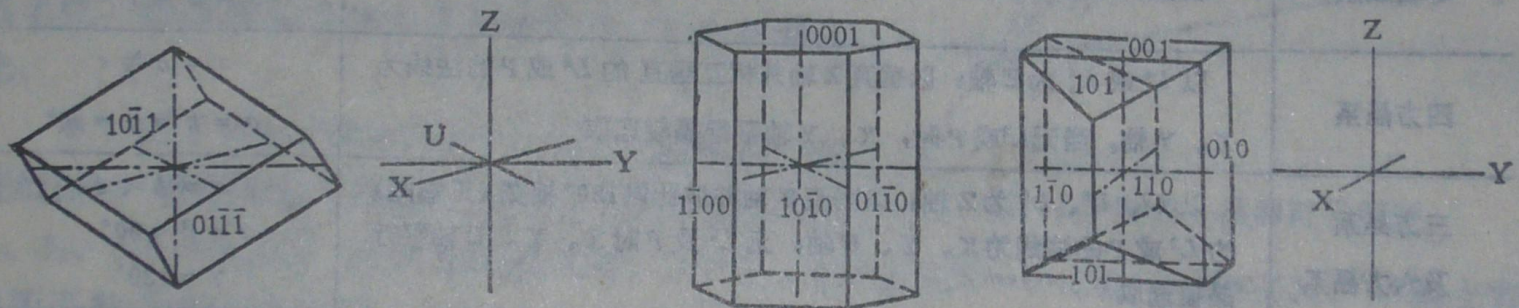
SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

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

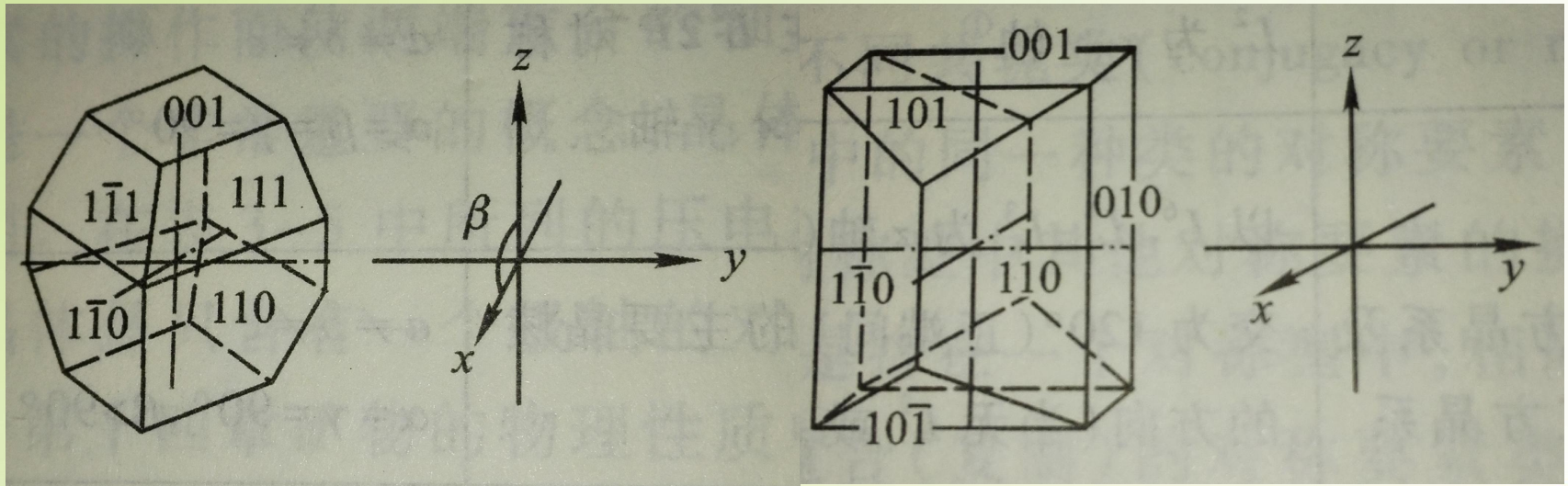


三方、六方晶系 $a=b \neq c$;
 $\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$

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



2.各晶系晶体常数特点



单斜晶系 $a \neq b \neq c$

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

三斜晶系 $a \neq b \neq c$

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



陕西国际商贸学院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE & COMMERCE

二、晶体定向的原则

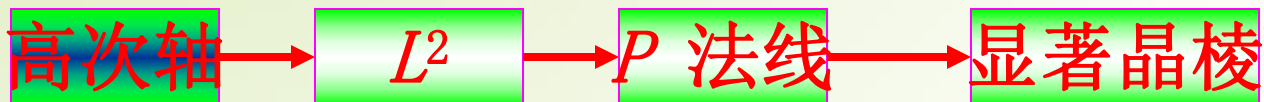
1、晶轴的选择

- ★ 应当符合晶体所固有的对称性

对称轴 \rightarrow 对称面的法线 \rightarrow 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

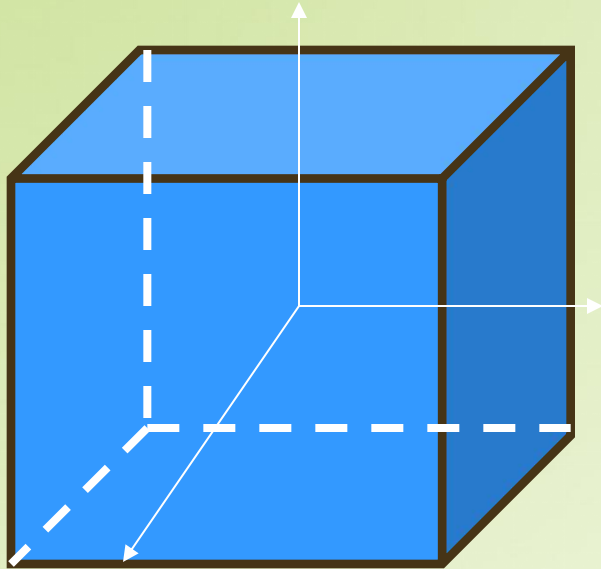
适用于等轴晶系、四方晶系、斜方晶系、单斜晶系、三斜晶系。

- 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

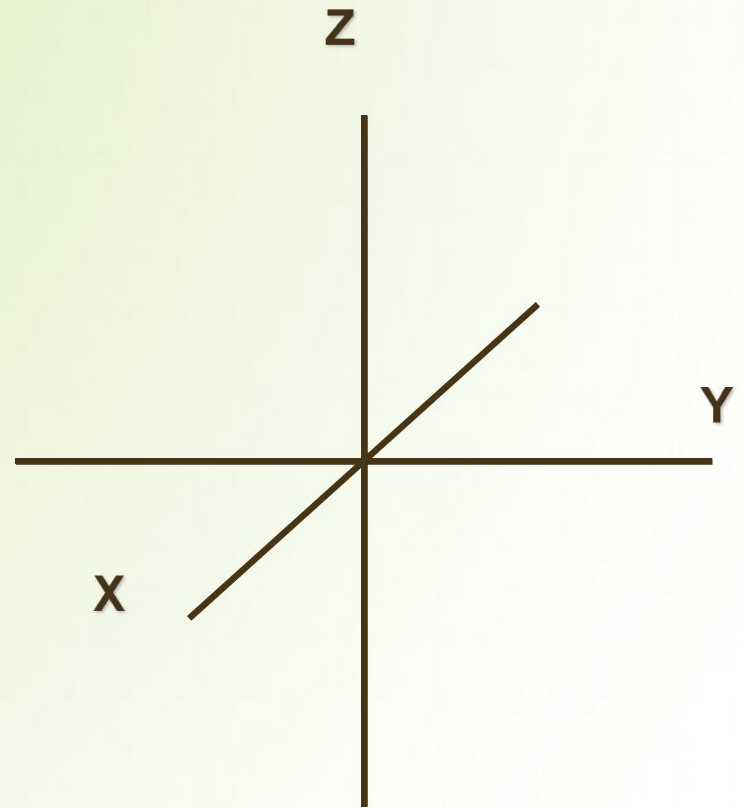


等轴晶系 $a=b=c$

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



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

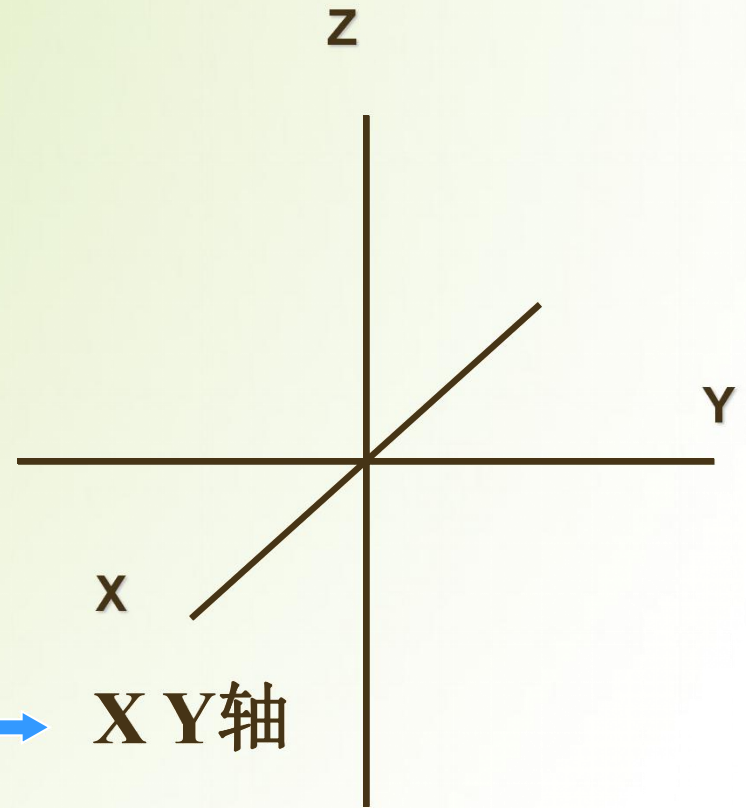
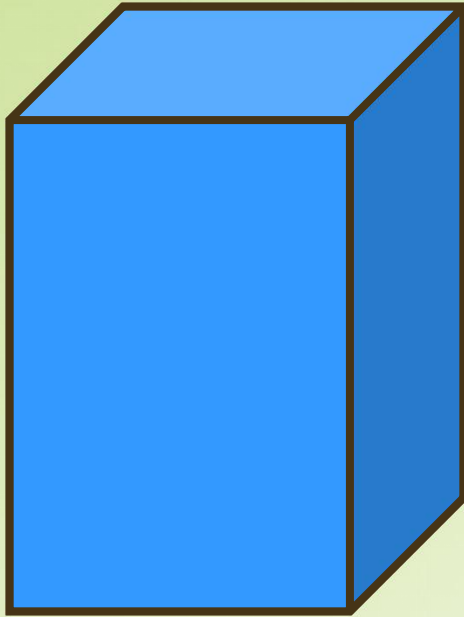


陕西国际商贸学院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

四方晶系 $a=b \neq c$

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



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

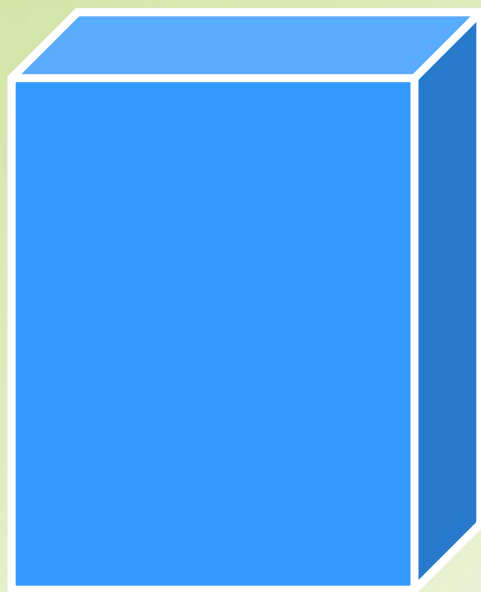


陕西國際商貿學院

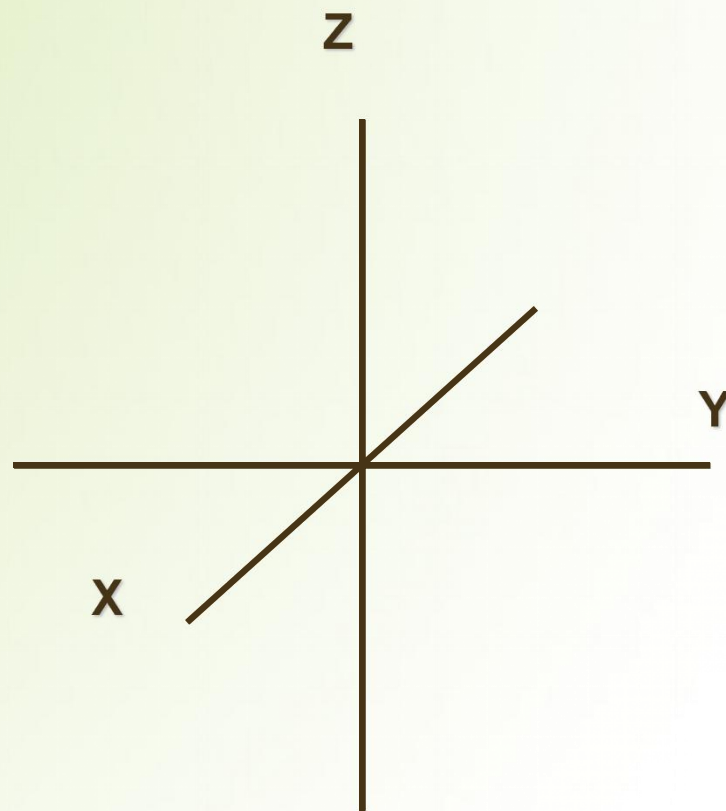
SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

斜方晶系 $a \neq b \neq c$

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



$3L^2/3P \rightarrow X Y Z$ 轴

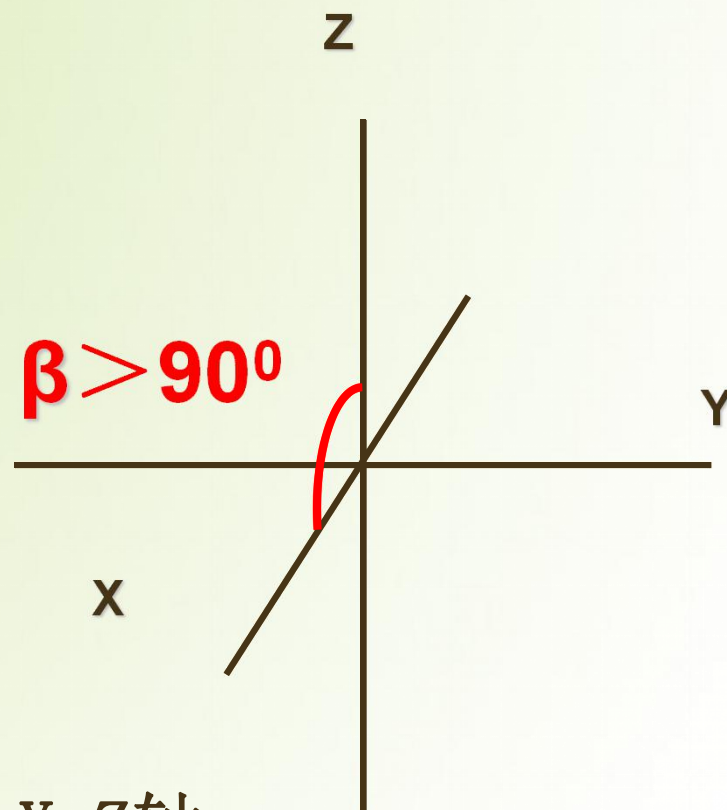
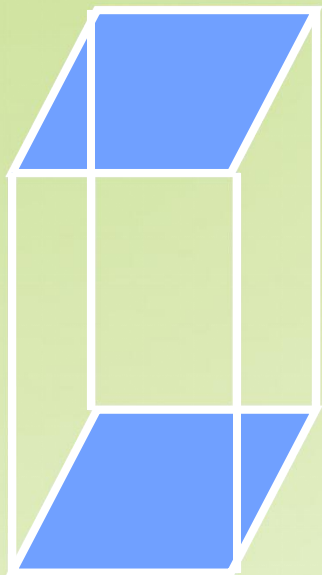


陕西国际商贸学院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

单斜晶系 $a \neq b \neq c$

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



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

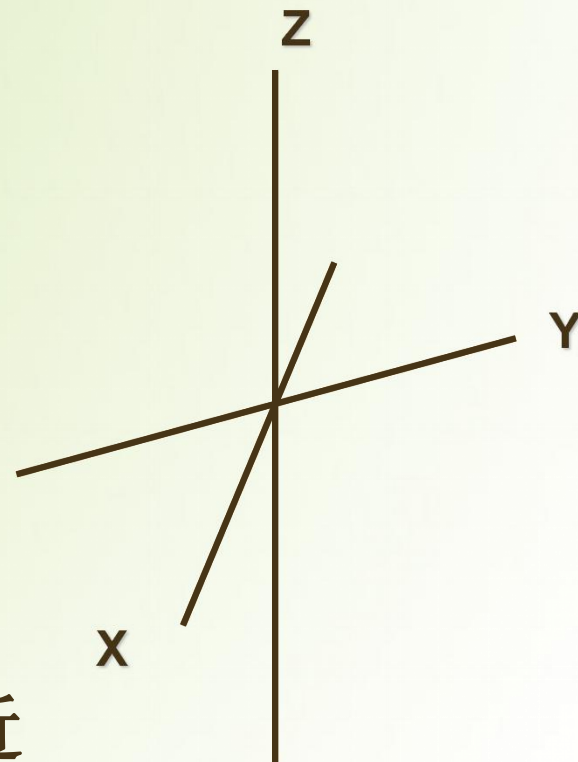
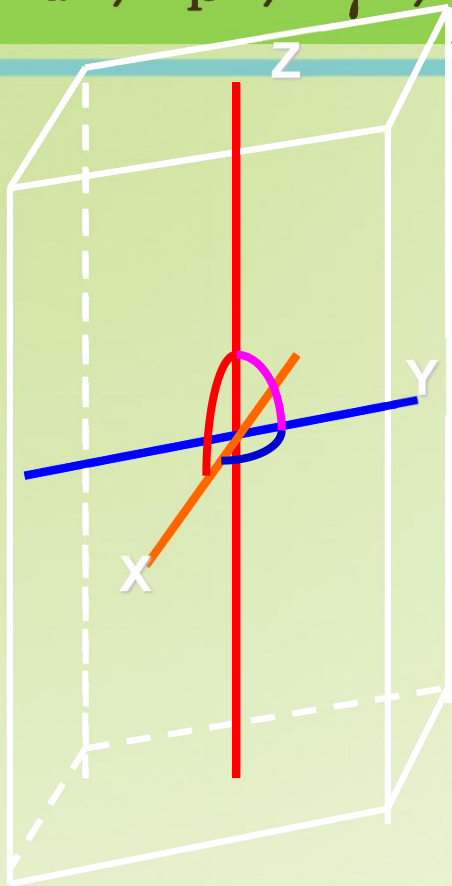


陕西国际商贸学院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

三斜晶系 $a \neq b \neq c$

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



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



陕西國際商貿學院

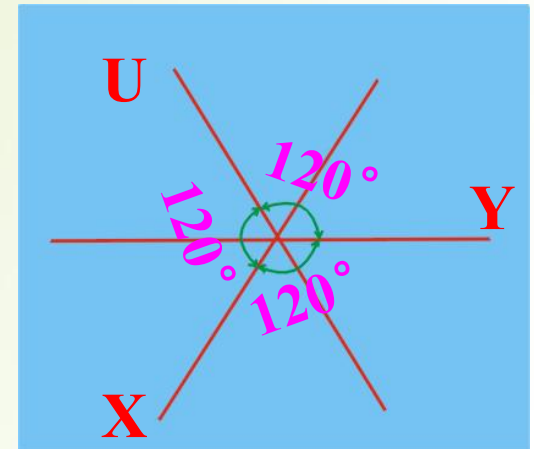
SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

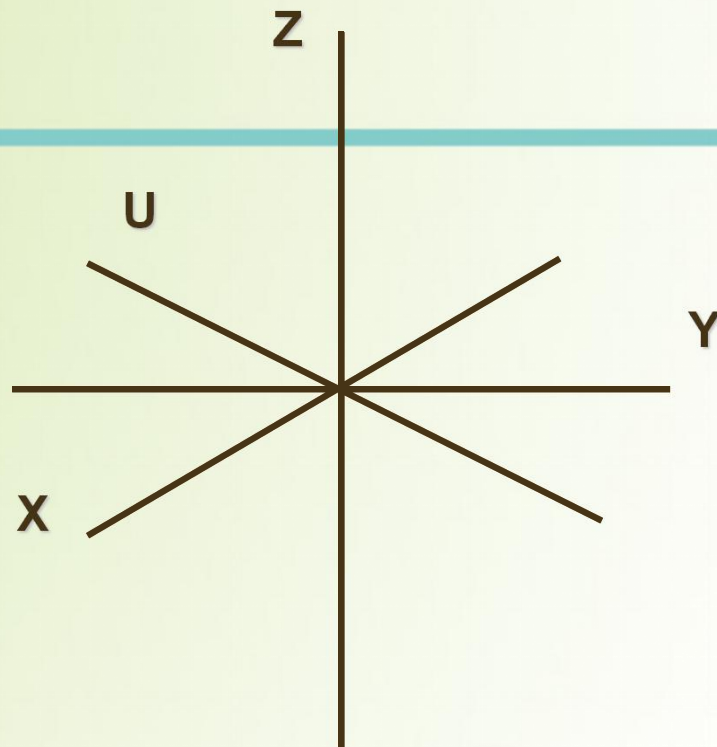
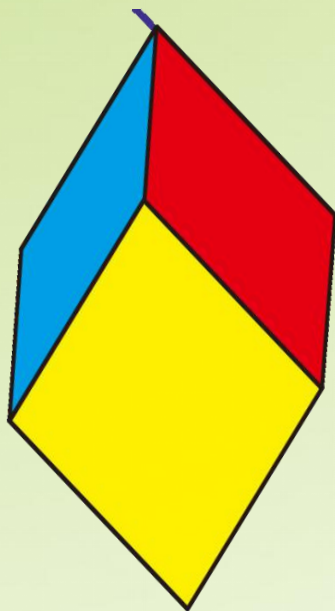
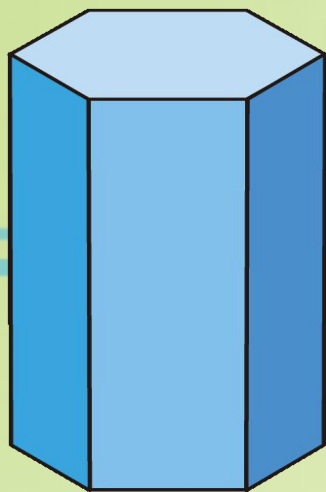
三、各晶系晶体定向的方法

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

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



陕西国际商贸学院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE & COMMERCE

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	a 轴前后水平, b 轴左右水平, c 轴直立; $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
		$3L_4^4L^36P$	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	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, $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
			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	
	三方晶系和三方晶族	$L^66L^2, L^66L^27PC,$ 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	唯一高次轴为直立的 c 轴	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				
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	$3L^2, 3L^23PC$	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^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			
	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			
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; $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ $\alpha > 90^\circ, \beta > 90^\circ, \gamma > 90^\circ$		



陕西国际商贸学院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE & COMMERCE

四、晶面符号与晶棱符号

1、晶面符号

(1) 定义：表征晶面空间方位的符号。

- 只涉及晶面在空间的方位与晶体的大小无关

(2) 表示：米氏符号

- 由英国人Miller (1839) 创立
- 含义：用晶面在各个结晶轴上的截距系数的倒数比来表示—— (hkl) 或 $(\bar{h}k\bar{l})$



陕西國際商貿學院

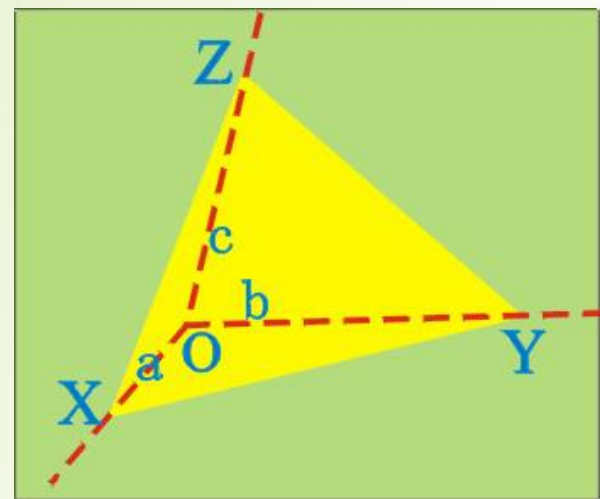
SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

例：一晶面在轴率为a:b:c的晶体上的截距系数 **p q r**

$$\text{为: } \frac{\overline{OX}}{a} : \frac{\overline{OY}}{b} : \frac{\overline{OZ}}{c} = p:q:r$$

取截距系数的倒数比为 **h k l**

$$\frac{1}{p} : \frac{1}{q} : \frac{1}{r} = h:k:l$$



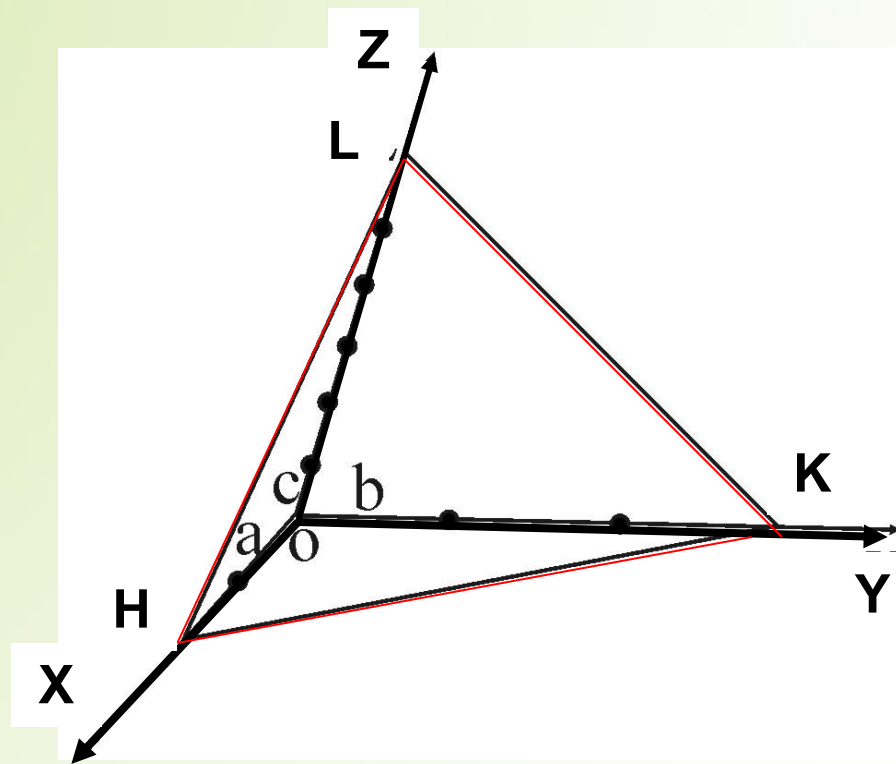
陕西国际商贸学院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

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。



陕西国际商贸学院

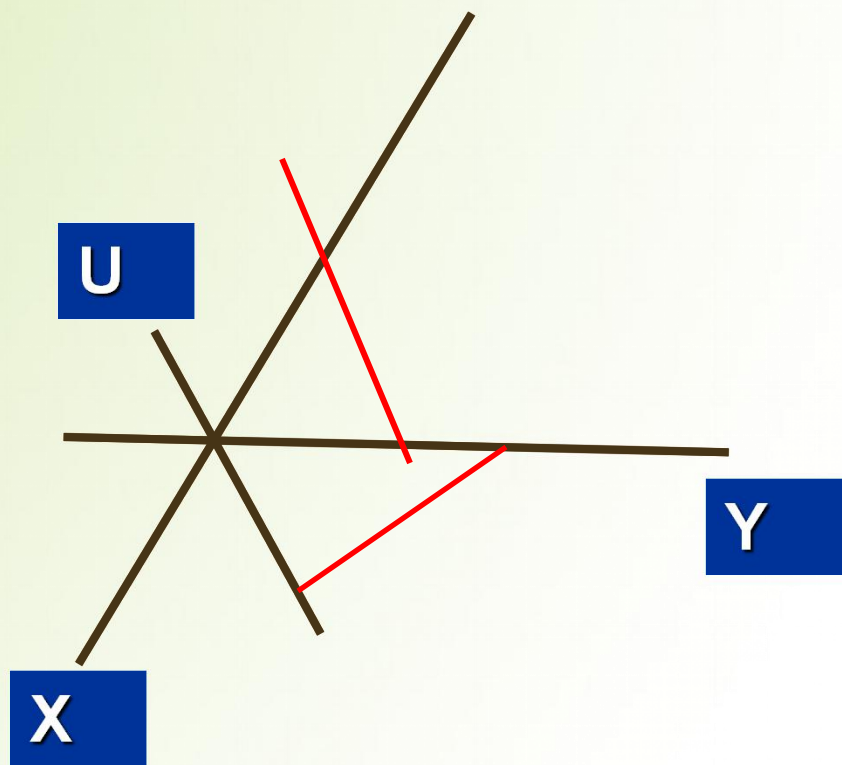
SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

(3)通常用 (hkl) 表示

h、k、l 叫晶面指数。

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。例如：

$(11\bar{2}0)$ $(10\bar{1}1)$ 等。



陕西國際商貿學院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

(4) 晶面指数的含义

整数定律 → 晶面在晶轴上的截距系数之比为简单的整数比

1. 晶面指数有正负之分 $(\bar{h} \ k \ l)$
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**



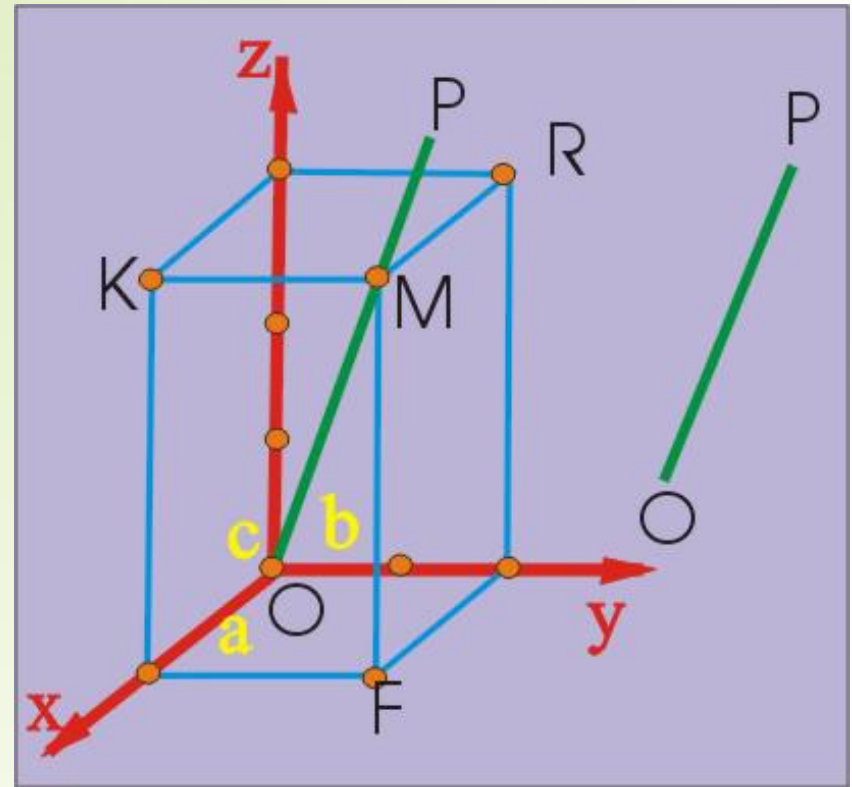
2. 晶棱符号

定义：表征晶棱（直线）在空间方向的符号

不涉及晶棱的具体位置，即所有平行晶棱具有同一个晶棱符号

确定方法：平移晶棱，使之通过晶体中心，在其上取一点，求出该点在3各晶轴上的截距系数之比，将所得结果放在[]中，即代表该晶棱的符号[rst]

$$\frac{x}{a} : \frac{y}{b} : \frac{z}{c} = r:s:t$$



陕西国际商贸学院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE

2. 晶棱符号

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。



2. 晶棱符号

晶带

交棱相互平行的一组晶面的组合，称为一个**晶带**。

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)。



陕西國際商貿學院

SHAANXI INSTITUTE OF INTERNATIONAL TRADE&COMMERCE