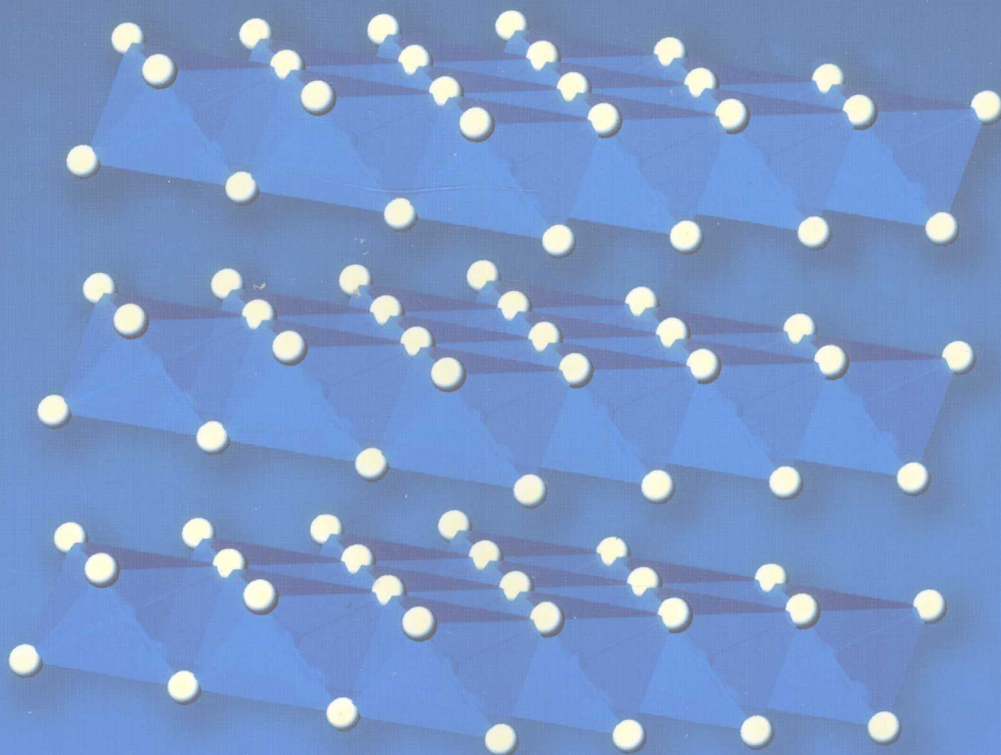


高等学校教材

JIEJING HUAXUE

结晶化学

何涌 雷新荣 编著



化学工业出版社

高等学校教材

结晶化学

何涌 雷新荣 编著



化学工业出版社

·北京·

结晶化学是一门专门讨论晶体的化学成分和结构与晶体本征性质之间关系的学科。本教材采用图解加描述的方式展现晶体本征性质与晶体成分和结构的联系。全书共分九章，第1章介绍晶体的概念，说明了晶体、准晶体和非晶态物质在结构上的异同；第2章从晶体的几何形态入手，重点介绍点群和基本结晶学符号；第3章的重点是空间群和等效点系，这些知识在建立晶体结构和解读各种分子谱图时十分重要；第4章介绍晶体结构的构成规律，并以实例介绍晶体结构分析的基本内容和步骤；第5章讨论晶体的化学成分特点和晶体化学式；第6章从结构缺陷入手介绍一些关于实际晶体结构的新认识，这些结构特征是形成功能材料一些性质的关键；第7章介绍晶体在科学技术上有广泛应用的物理性质及其成因；第8章介绍了晶体的化学分类原则，并在该分类体系下比较全面地介绍了在科学技术上得到应用的50种晶体的成分、结构、主要物理性质和应用现状；第9章简要地介绍了结晶材料的计算机模拟技术，即计算材料学。

本书适于材料科学、应用化学、结构化学、固体物理学和理论化学等相关学科的研究生、本科生和研究人员及教师使用，也可作为从事与晶质材料制备和性质改进有关人员的参考书。

图书在版编目 (CIP) 数据

结晶化学/何涌, 雷新荣编著. —北京: 化学工业出版社, 2008. 7
高等学校教材
ISBN 978-7-122-03191-4

I. 结… II. ①何…②雷… III. 结晶化学-高等学校-教材 IV. O74

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2008) 第 097403 号

责任编辑: 宋林青
责任校对: 郑捷

文字编辑: 刘志茹
装帧设计: 史利平

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)
印装: 化学工业出版社印刷厂
787mm×1092mm 1/16 印张 12 $\frac{1}{4}$ 字数 296 千字 2008 年 9 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899
网 址: <http://www.cip.com.cn>
凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 28.00 元

版权所有 违者必究

前言

众所周知，晶体的性质是由其成分和结构决定的。晶体有两种用途，一是作为原料，二是作为材料。作为原料，利用的是其化学成分；作为材料，利用的是其物理性质。结晶化学是一门专门讨论晶体的化学成分和结构与晶体性质之间关系的学科。这里所讲的性质指晶体的本征性质，即由晶体的成分和结构决定的性质，如晶体的热胀系数和铁电性等。结晶质材料有两种基本状态：单晶体和多晶集合体（包括单相和多相）。本教材将单晶体状态材料称作晶体，而将多晶集合体叫做晶质材料以示区别。之所以这样强调，是因为多晶材料除了具有晶体的本征性质外，还展现出一些非本征性质，其中一些具有重要的技术价值，如铁电陶瓷的正温度系数（PTC）特性和结构陶瓷的抗热震能力等，这些性能主要受控于材料的显微结构。原则上，结晶化学讨论的是晶体的本征性质。由于本征性质随晶体成分和结构的改变而变化，这使得定量裁制晶体的性质成为可能。定量裁制材料的性质是人类利用材料的终极目标，而结晶化学知识可以帮助我们在结晶质材料方面达到这一目标，虽然现在还远远没有达到。由此可以看出结晶化学是一门相对年轻的学科，也是极富活力的学科。

在达到定量裁制晶体性质这个目标的过程中，结晶化学知识可用来改善材料的性质，例如尖晶石型铁氧体的磁性通过改变其化学成分得到大幅度提高；结晶化学知识也已经被用来为特殊工况选择材料，如为反复冷热激变的工作环境选择低热胀系数的材料；在没有现成的合适材料时，晶体化学知识可以指导我们制备出适合某工况的材料：调整某类晶体的成分和结构，如NZP材料，将它的低热胀系数降低到接近于零，那么材料就可以抵抗严酷的冷热激变环境，达到显著降低生产成本的目的。事实上，已经有不少专门技术从结晶化学的概念中诞生，如（晶质）材料掺杂改性技术的理论依据就是晶体的类质同象，一些结晶质膜的制备原理是基于晶体外延生长的概念等。结晶化学指出，异质同象（即结构相同，成分不同）晶体具有相似的性质：在这一认识的指导下，人们就可以制备出更多新型的晶体，以致更多的新型晶质材料，如 β -石英具有负的热胀系数，但不能稳定存在于常温，而与之同结构的一种锂辉石可以稳定地存在于室温，因具有负的热胀系数而得到实际应用；这样的例子还有很多，预期将来还会不断涌现。根据结晶化学原理，人们可以在现有晶体各种有用性质的基础上，在具有相同和衍生（类似）结构的晶体中找寻类似的性质，然后改善它们，最终开发利用它们为人类服务。简单地说，就是结晶化学知识具有启发功能，启发人们有目的地去发现和制备新材料，从已知材料上发现新性质，从而开发出新用途。以上所述还只是结晶化学关于成分和结构决定性质的一面。

结晶化学的另一面是晶体本征性质的微小变化，反映了晶体成分和结构的细微变化，专业地说是晶体性质对晶体结构缺陷或缺陷结构构型的揭示作用。结晶化学的这一方面内容在人类实物观察能力有限的今天尤为重要，例如，我们至今尚不能看到电子，也不能方便、清晰

地看到晶体的原子像以及晶体结构缺陷和缺陷团的构型特征与分布规律，而晶体结构缺陷恰是功能材料的有用性质的发源地。为了认识和理解功能材料有用性质的成因和化学元素的某些性质，人类目前只能通过各种谱学（如红外光谱、拉曼光谱、吸收光谱、核磁共振谱等）图形来代替直接的肉眼观察，间接形成这些物质的图像。如果没有结晶化学知识，一些分子光谱就不可能得到合理的解释；因为对无机晶体而言，所谓分子光谱就是晶体中一种无限大量、规则重复排列的基团（在一些学科中称为分子）对外来能量的激发作出反应，当这些反应被记录下来就形成了各种“谱”；通过“读谱”，再在人们脑海里建立起基团的实物图像。从这个过程可以看出，利用晶体化学知识理解晶体结构（或分子）的细微变化还取决于测试技术的进步。试想，如果在技术上不能记录下那些微弱的信号，还怎么去读它呢？

这本“结晶化学”正是基于以上理念而编写的。教材在内容安排上尤其注重展现晶体本征性质与晶体成分和结构的联系。在内容讲述上，本教材没有采用数理推导的方式，而是采用了直观易懂的图解加描述的方式。因为编者考虑本书的大多数读者是利用结晶化学知识去解决工作和学习中遇到的种种问题，而不是去做深入的理论研究；对那些准备和正在这方面做深入理论研究的读者，本教材也不失为一本有益的参考书，因为任何理论推导都需要实物模型的支撑。在编写过程中，编者参考了大量的专著和学术论文，为节省篇幅，参考文献中只列出了主要专著，应该承认略去学术论文是本教材的一大缺憾。

教材的编写分工如下：第1、4、5、6、7和9章由何涌博士执笔，第2章由杨志红博士执笔，第3和8章由雷新荣博士执笔。全书初稿完成后，由何涌统一文字和图件，对全书内容进行修改和调整；最后由何涌定稿。书中最终付印图件全部由何涌统一完成，其中晶体形态和晶体结构图件分别用软件 SHAPE 7.1 和 ATOM 6.2 完成。

何涌

2008年4月于武汉

目 录

第1章 概论	1
1.1 晶体的概念	1
1.1.1 晶体的定义	1
1.1.2 晶体结构、玻璃结构和准晶结构的异同	2
1.2 晶体的基本性质	3
第2章 晶体的宏观对称	5
2.1 单形	5
2.1.1 单形的概念	5
2.1.2 几何单形	5
2.1.3 几何单形的聚合	8
2.2 点群	9
2.2.1 对称的概念	9
2.2.2 宏观对称要素和对称操作	9
2.2.3 对称要素的组合定理	12
2.2.4 点群	13
2.3 晶体的对称分类	14
2.3.1 晶体的对称分类	14
2.3.2 点群与结晶单形	14
2.4 结晶符号	16
2.4.1 晶体定向	16
2.4.2 晶面符号	19
2.4.3 晶棱符号	21
2.4.4 单形符号	22
2.5 点群的符号	23
2.5.1 点群的国际符号	23
2.5.2 点群的圣佛利斯 (Schönflies) 符号	25
2.6 晶体的规则连生	25
2.6.1 双晶	25
2.6.2 外延生长 (浮生)	27
2.6.3 固溶体离溶 (交生)	28

第3章 空间群	29
3.1 空间格子	29
3.1.1 空间格子要素	29
3.1.2 平行六面体的选择原则	30
3.1.3 在晶体结构中确定空间格子的方法	31
3.1.4 十四种布拉维格子	32
3.2 晶体内部结构的对称要素	36
3.2.1 平移轴	36
3.2.2 螺旋轴	36
3.2.3 滑移面	38
3.3 空间群	40
3.3.1 空间群的基本概念	40
3.3.2 空间群符号	41
3.4 等效点系	47
第4章 晶体的结构	50
4.1 最紧密堆积原理	50
4.1.1 等大球最紧密堆积	50
4.1.2 非等大球紧密堆积	52
4.2 配位数和配位多面体	52
4.2.1 配位数	52
4.2.2 配位多面体及其对称性	52
4.2.3 配位多面体的连接	53
4.3 鲍林法则	54
4.4 晶体结构基型	55
4.5 同质多象	56
4.5.1 同质多象的概念	56
4.5.2 同质多象的转变	56
4.6 异质同象	57
4.7 多型	58
4.7.1 多型的概念	58
4.7.2 多型的符号	59
4.8 晶体的典型结构分析	60
4.8.1 萤石结构	60
4.8.2 烧绿石结构	62
4.8.3 闪锌矿结构	63
4.8.4 纤维锌矿结构	63
4.8.5 尖晶石结构	64
第5章 晶体的化学组成	67
5.1 晶体的化学成分	67

5.1.1	阴离子	67
5.1.2	阳离子	70
5.1.3	原子	70
5.1.4	晶体中的水	70
5.1.5	化学计量性和非化学计量性	71
5.2	类质同象	71
5.2.1	类质同象的概念	71
5.2.2	类质同象的类型	72
5.2.3	影响类质同象的因素	73
5.2.4	常见类质同象系列	74
5.3	晶格类型	75
5.4	晶体化学式及其计算	76
5.4.1	晶体化学式表示方法	77
5.4.2	晶体化学式的用途举例	77
5.4.3	晶体化学式的计算	78
第6章 实际晶体结构		81
6.1	结构缺陷	81
6.1.1	点缺陷的基本类型	81
6.1.2	点缺陷的运动和相互作用	82
6.1.3	缺陷簇团	83
6.2	实际晶体结构	86
6.2.1	利用点缺陷, 不引起晶体结构再造的缺陷簇团	86
6.2.2	利用点缺陷, 引起晶体结构再造的缺陷簇团	88
6.2.3	重建结构, 形成结晶学共享面以湮灭点缺陷	88
6.2.4	晶体的非晶质化	89
6.3	结构缺陷对晶体性质的影响举例	91
第7章 晶体的物理性质		93
7.1	晶体的光学性质	93
7.1.1	晶体的颜色	93
7.1.2	晶体的折射率	100
7.1.3	晶体的发光性	101
7.2	晶体的力学性质	103
7.2.1	晶体的密度	103
7.2.2	晶体的弹性模量	105
7.2.3	晶体的破裂和解理	106
7.2.4	晶体的硬度	108
7.3	晶体的磁性	109
7.3.1	磁介质的磁性成因	109

7.3.2	铁磁性晶体的磁性特征	109
7.3.3	铁氧体	110
7.4	晶体的电学性质	111
7.4.1	导电性	111
7.4.2	介电性	113
7.4.3	压电性	113
7.4.4	热电性	114
7.4.5	铁电性	114
7.5	晶体的热学性质	115
7.5.1	熔点和熔化行为	115
7.5.2	热容	116
7.5.3	热导率 (k)	116
7.5.4	热胀系数	117

第8章 常见晶体的结构与性质

8.1	晶体的晶体化学分类	121
8.2	第一大类 单质	122
8.2.1	第一类 金属单质	122
8.2.2	第二类 非金属单质	123
8.3	第二大类 卤化物	128
8.3.1	石盐族	128
8.3.2	萤石族	129
8.4	第三大类 硫化物	130
8.4.1	闪锌矿族	130
8.4.2	纤维锌矿族	131
8.4.3	红砷镍矿族	132
8.5	第四大类 氧化物和氢氧化物	133
8.5.1	综述	133
8.5.2	第一类 氧化物	134
8.5.3	第二类 氢氧化物	147
8.6	第五大类 含氧盐	149
8.6.1	第一类 硅酸盐	149
8.6.2	第二类 碳酸盐	166
8.6.3	第三类 磷酸盐	168
8.6.4	第四类 硫酸盐	170
8.7	第六大类 非氧化物	172
8.7.1	第一类 碳化物	172
8.7.2	第二类 氮化物	174
8.7.3	第三类 硼化物	176

第9章 晶体的模拟研究简介	179
9.1 第一原理方法	179
9.1.1 Hartree-Fock (HF) 自洽场 (SCF) 理论和方法	180
9.1.2 Moller-Plesset (MP) 微扰理论	180
9.1.3 耦合官能团理论	181
9.1.4 密度泛函理论	181
9.1.5 其他模型与方法	181
9.2 分子动力学方法	181
9.2.1 势能模型	182
9.2.2 原子体系的运动方程和边界条件	182
9.2.3 分子动力学模拟的基本过程	182
9.3 原子力学方法	183
9.4 蒙特卡罗方法	184
参考文献	185

第1章 概论

1.1 晶体的概念

1.1.1 晶体的定义

什么是晶体？内部质点（原子、离子、离子团和分子等）在三维空间周期重复排列所构成的固体就是晶体。晶体的定义揭示：晶体的构成基元是原子或离子，它们可以是一种，也可以是多种；晶体是用三轴坐标体系（ X, Y, Z ）标定的，故其中每一个基元的空间位置可以被精确标定。既然有多种质点在三维空间周期性重复排列，晶体就应该有一个供周期重复排列的最小重复单位，这个最小重复单位叫晶胞。

图 1.1 是石盐（ NaCl ）部分晶体结构的剖面图，图中大灰球是 Cl^- ，小黑球是 Na^+ ， Cl^- 和 Na^+ 之间的连线表示为化学键。反映晶体中全部基元之间关联特征的整体称为晶体结构。晶体结构有 4 种结构要素。第一种结构要素是质点，即构成晶体的离子或原子，如果质点，即图 1.1 中的 Cl^- 和 Na^+ 分别按确定的距离 a 沿 X, Y, Z 方向无间隙地平移，可将整个晶体结构“复制”出来。

第二种结构要素是行列，它是质点在一维方向上周期重复排列构成的一条直线；晶体结构中的行列可由同种离子或原子构成，也可由不同的离子或原子构成，如图 1.1 中的行列 OG 和 OY 。每一根行列都有一个最小重复长度，如行列 OY 上的长度 OB ；沿着行列 OY 的正、负方向无间隙地平移 OB 即可“复制”出一条无限长、具有周期排列规律的行列。互相平行的相同行列归为一组，同组行列的最小重复长度相等，不互相平行的行列的最小重复长度一般不等。

第三种结构要素叫面网。面网是质点在二维方向上周期重复排列所形成的平面，构成面网的离子或原子可以相同，也可以不同，如图 1.1 中的面网 EDG 和 $OZIIY$ 。每个面网有一个二维的最小重复单位面积，如图 1.1 中的正方形网格 $OCDB$ 就是面网 $OZIIY$ 的最小重复单位面积；在二维方向（ YZ 平面）无间隙地平移网格 $OCDB$ 不仅复制出面网 $OZIIY$ ，还可以复

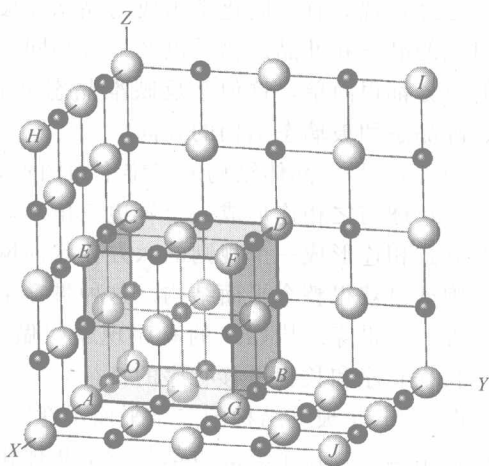


图 1.1 氯化钠部分晶体结构的剖面图

制出一个包含 OZ 的无穷大面网。相互平行的相同面网（平移重复）归为一组面网，同组面网中相邻两面网间的距离叫面网间距（ d ）。同组面网间的面网间距相等，不同组面网间的面网间距一般不等。

第四种结构要素是晶胞，即晶体结构的最小重复单位。实际上，由 X 、 Y 、 Z 轴中的两个轴界定的三组面网的最小重复单位所围成的一个几何多面体就是该结构的晶胞，如图 1.1 中的晶胞 $OAGBDFEC$ 。将图 1.1 中的晶胞 $OAGBDFEC$ 在三维空间无间隙地平移即可将整个石盐晶体结构建立起来（确定晶胞的具体方法在第 3 章空间格子一节中介绍）。晶胞给出了

晶体结构的完整信息，同时为晶体的研究带来了极大的方便：任何晶体结构是其晶胞在三维空间的简单平移重复，如果搞清了晶胞的特点，整个晶体的成分和结构特征就清楚了；由于晶体的性质是由其成分和结构决定的，所以晶体性质的形成原因也就容易查清楚了。从图 1.1 容易想象，如果让石盐的晶胞无限平移，石盐晶体的形状一定是一个立方体，而石盐晶体的晶面只是其结构中最外层的那六个面网。

晶胞的形状和大小由晶格常数确定。从石盐晶体的晶胞图（图 1.2）中可以看出晶胞由三组单位面网围成，每两组单位面网的交线形成的三组行列构成了晶胞的轮廓线。首先，定义 O 点为原点，取交 O 点的三根行列 OX 、 OY 、 OZ 方向分别为晶轴 X 、 Y 、 Z ，三晶轴的轴单位长 a_0 、 b_0 、 c_0 分别等于 OA 、 OB 、 OC 。晶轴 Y 与 Z 的夹角（轴角）为 α ，晶轴 Z 与 X 的轴角为 β ，晶轴 X 与 Y 的轴角为 γ 。显然，晶胞的大小和形状由参数 a_0 、 b_0 、 c_0 、 α 、 β 、 γ 决定，这六个参数一起被叫做晶体常数或晶格常数。

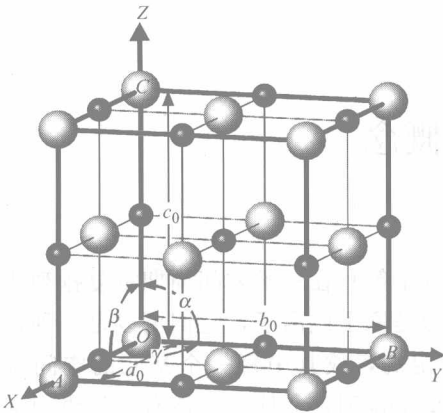


图 1.2 氯化钠的晶胞和晶体常数
大球是 Cl^- ，小球是 Na^+

1.1.2 晶体结构、玻璃结构和准晶结构的异同

自然界中的固体有三种状态：晶态、准晶态和玻璃态；三种状态对应三种结构特征。目前，已经发现具有相同化学组成的晶态和玻璃态物质，但还没有证据显示发现了具有相同化学组成的晶态和准晶态物质以及具有相同化学组成的玻璃态和准晶态物质。已知的准晶态物质的成分都很简单，这似乎反映准晶态可能是晶态和玻璃态之间的过渡态。图 1.3 示出晶态、准晶态和玻璃态结构的异同。

图 1.3a 是一晶体结构的二维平面图像，由小黑球和大灰球两种质点构成。每个黑球都有三个灰球与之相连形成一个等边三角形，这种规律称为短程有序。那些等边三角形以共角顶的方式相连形成一个规则的六方孔状面网，其平面晶胞为一菱形（见图），无隙地平移菱形晶胞即可获得整个平面结构。这种贯穿结构始终的有序现象称作长程有序，而那种通过平移实现的、贯穿结构始终的有序现象叫做长程平移有序。显然，晶体结构同时具有短程有序、长程有序和长程平移有序的特征。

图 1.3b 是玻璃结构的二维平面示意图，该玻璃具有与图 1.3a 晶体相同的化学组成。在该玻璃结构中，每个黑球也都与三个灰球相连形成等边三角形，即玻璃结构具有短程有序特征。虽然等边三角形也以共角顶的方式相连，但这些等边三角形彼此相连的角度是任意的，

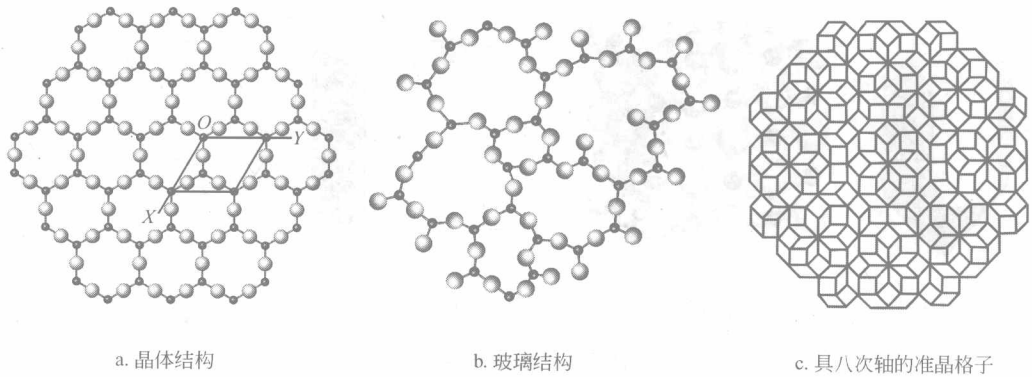


图 1.3 晶态、玻璃态和准晶态物质二维结构的区别

导致整个结构不显示任何规律，更不能从中找出一个可供平移的晶胞。因此，玻璃结构只具有短程有序特征，没有长程有序规律。

图 1.3c 是一个具有八次对称轴的准晶格子图，容易看出整个格子的排列十分规则有序，即具长程有序规律，但却找不出一个可供平移而获得整个结构的晶胞。因此，结构具有长程有序而无平移长程有序特征的物质被定义为准晶。

1.2 晶体的基本性质

晶体性质取决于晶体的化学成分和结构。不同的晶体可以具有不同的化学成分和不同的结构，也可以具有相同的化学成分和不同的结构，还可以具有不同的化学成分和相同的结构，而相同的晶体一定具有相同的化学成分和相同的结构。虽然每种晶体都有区别于其他晶体的个性，但凡是晶体都具有下述共有的基本性质。

(1) 自限性

晶体能自发地形成封闭的凸几何多面体外形的现象叫做自限性。换句话说，发育完好的晶体必然是由平的晶面、直的晶棱和尖的角顶围成，如石英晶体（图 1.4a）。晶体外形是内部结构的体现。晶体结构由无数个晶胞在三维空间周期紧密排列而成，所以，晶体结构上最外的那层面网就是晶面，而晶棱就是两面网相交的一条行列，角顶就是质点的所在。面网、行列、离子或原子和晶面、晶棱、角顶的对应关系示于图 1.4b 中。立方体（图 1.4c）是食盐晶体的常见晶形；宏观尺度看晶面是一平面，但在纳米尺度上看晶面，其图像如同图 1.4b 示出的一样。图 1.4b 和 c 清楚地表达出了食盐晶体的形态与晶体结构以及晶胞的依存关系，因此，晶体的外形只能形成凸几何多面体。

(2) 对称性

对称就是相同部分的重复出现。晶体上的相同部分，包括形态和物理性质，在不同方向上有规律地重复出现表现出晶体的对称性。图 1.4d 是石英晶体（图 1.4a）//Z 轴的投影图，图中直线是晶棱，晶棱围起来的平面是晶面，X、Y、Z 是三根晶轴的出露点。在图 1.4d 中可分出三个相同部分，彼此间的方位相差 120° ，即正下方的那组晶面绕 Z 轴旋转 360° ，相同图形会重复出现三次；又因为晶面即是面网，所以，当晶体绕 Z 轴旋转 360° 时，相同的面网重复出现三次意味着相同的物理性质也会重复出现三次。以上讨论证明了晶体的

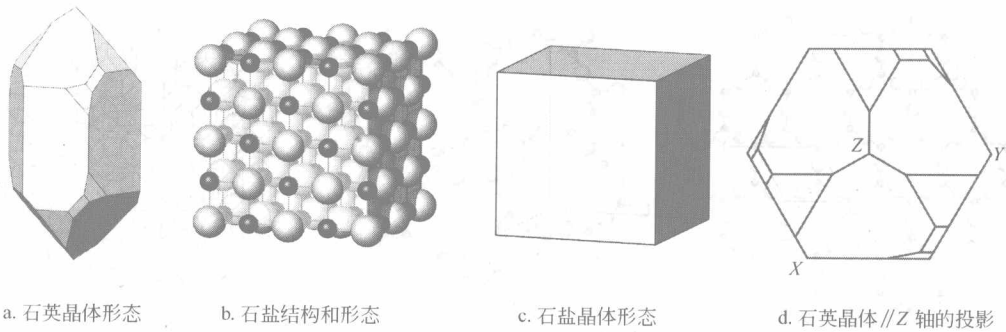


图 1.4 几种晶体形态

对称性。晶体的对称性还可以被更简单地证明：晶体结构中的质点在三维空间周期重复排列的现象就是对称，因为晶体结构是对称的，所以晶体是对称的。

(3) 异向性

晶体的性质随方向不同而不同的现象即为异向性。在图 1.3a 的二维晶体结构中容易看出，平行 Y 轴方向与垂直 Y 轴方向上质点的排列方式和单位长度内质点的数量明显不同，该现象反映了不同方向上的结构和成分存在区别，因此，晶体在这两个方向上的性质一定存在区别，这就是晶体异向性的产生原因。读者可以容易地在图 1.4b 中找出晶体异向性的证据。

(4) 均匀性

晶体的均匀性指晶体上任何不同部位的物理性质和化学性质相同。既然晶体结构是晶胞在三维空间周期重复排列的结果，那么，在晶体不同部位取一块样品，其中至少包含一个晶胞，即使是数万个晶胞，其中质点的种类和排列规律是完全一样的，因此，晶体各部分的物理和化学性质必然完全一样。这就是晶体均匀性之所在。

(5) 稳定性

稳定性指晶体的内能最小，准确地说是同成分不同物态的物质中，晶体最稳定。在晶体中，当被束缚在固定晶格位置上的质点获得能量后，离（原）子之间的距离变大；随着能量的增加，晶体熔融变成无定形态的熔体，即晶体的长程有序首先被破坏；当熔体继续获得能量就会变成气体。在自然界中，结晶的矿物形成后可以稳定存在数亿年，而玻璃，尤其是天然的玻璃在漫长的地质年代中都会自发地转变成晶态。实验上，将 NaCl 晶体粉末加热到 801°C ，晶体开始熔化，这时体系的温度保持在 801°C ；直到 NaCl 晶体粉末全部熔化以后，体系的温度才继续上升；到达 1465°C 时，NaCl 熔体开始汽化。当气态的 NaCl 突然遭遇室温，它们立即沉淀成固态（不是晶态）。可见，就同成分物质的物态而言，晶态最稳定是因为它的内能最小。

第2章 晶体的宏观对称

2.1 单形

2.1.1 单形的概念

单形是由对称要素联系起来的一组晶面的组合。单形的特点是：属于同一单形的晶面同形等大；不同形等大的晶面属于不同的单形。图 2.1 的两个晶体图中，晶体 a 上的全部晶面都是一种同形等大的等腰三角形，显然晶体 a 是一个单形，换句话说就是该单形由 12 个相同的等腰三角形晶面围成。晶体 b 由两种不同形态的晶面围成，所以它不是单形。

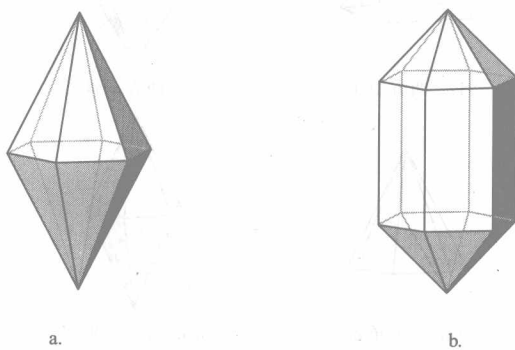
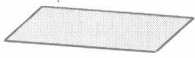


图 2.1 两种晶体的立体图

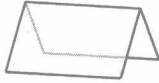
2.1.2 几何单形

(1) 47 种几何单形

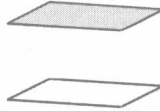
几何单形共有 47 种，它们的名称和形态特征分别示于图 2.2 中。学习几何单形时要同时记住单形名称和单形上平面的数量。在单形名称后打有“*”的 14 种单形要求熟练掌握，其余只需一般了解。图中 1~7 号单形归为低级晶族的单形。3 号平行双面由大小和形态相同、彼此平行的两个面构成。虽然斜方四面体、斜方柱和斜方单锥都由 4 个面构成，但斜方四面体的 4 个面构成一个封闭的空间，而斜方柱和斜方单锥分别有 2 个和 1 个开口。斜方双锥由 8 个不等边三角形晶面围成。需要注意的是斜方柱、斜方单锥和斜方双锥的横截面都为菱形。



1. 单面



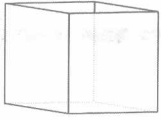
2. 双面



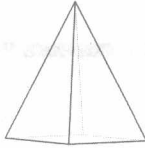
3. 平行双面*



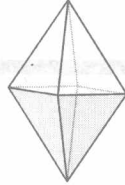
4. 斜方四面体



5. 斜方柱



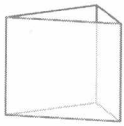
6. 斜方单锥



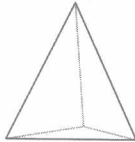
7. 斜方双锥*



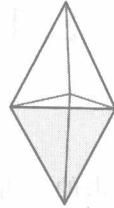
5~6 号的横截面图形



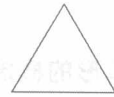
8. 三方柱*



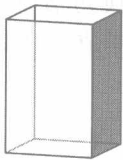
9. 三方单锥



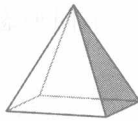
10. 三方双锥*



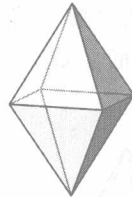
8~10 号的横截面图形



11. 四方柱*



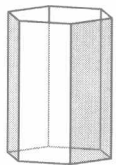
12. 四方单锥



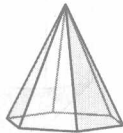
13. 四方双锥*



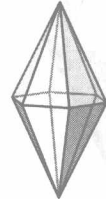
11~13 号的横截面图形



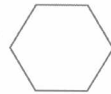
14. 六方柱*



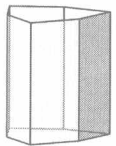
15. 六方单锥



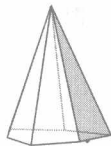
16. 六方双锥*



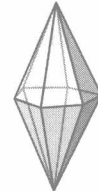
14~16 号的横截面图形



17. 复三方柱



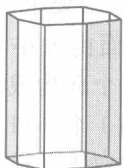
18. 复三方单锥



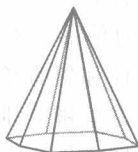
19. 复三方双锥



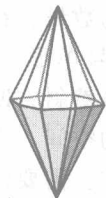
17~19 号的横截面图形



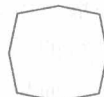
20. 复四方柱



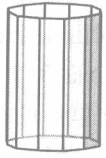
21. 复四方单锥



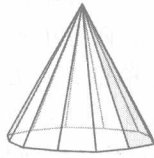
22. 复四方双锥



20~22 号的横截面图形



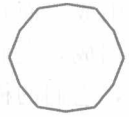
23. 复六方柱



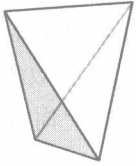
24. 复六方单锥



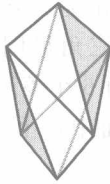
25. 复六方双锥



23~25 号的横截面图形



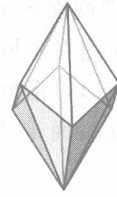
26. 四方四面体*



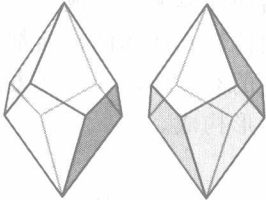
27. 复四方偏三角面体



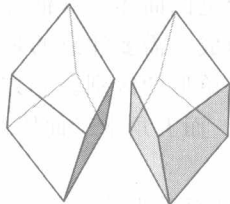
28. 菱面体*



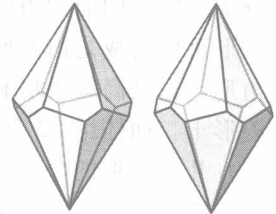
29. 三方偏三角面体



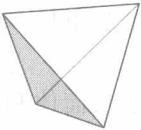
30. 四方偏方面体 (左、右形)



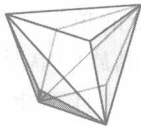
31. 三方偏方面体 (左、右形)



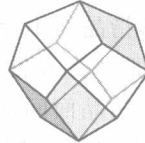
32. 六方偏方面体 (左、右形)



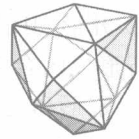
33. 四面体*



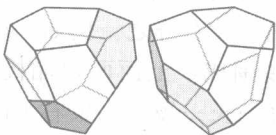
34. 三角三四面体



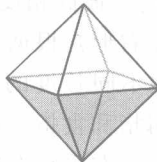
35. 四角三四面体



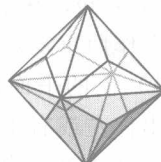
36. 六四面体



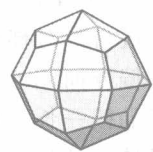
37. 五角三四面体 (左、右形)



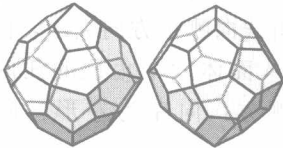
38. 八面体*



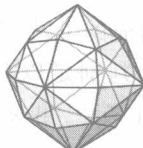
39. 三角三八面体



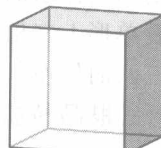
40. 四角三四面体



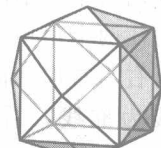
41. 五角三四面体 (左、右形)



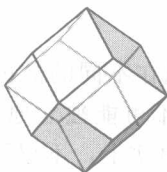
42. 六八面体



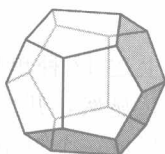
43. 立方体*



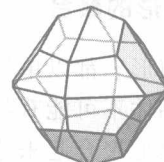
44. 四六面体



45. 菱形十二面体*



46. 五角十二面体



47. 偏方复十二面体

图 2.2 47 种几何单形