

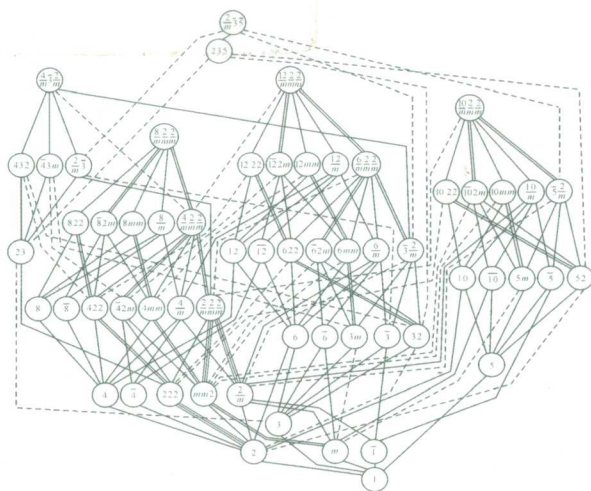
“十一五”国家重点图书出版规划项目

现代化学基础丛书 20

现代晶体化学

Modern Crystal Chemistry

陈敬中 等 编著



科学出版社

www.sciencep.com

“十一五”国家重点图书出版规划项目
现代化学基础丛书 20

现代晶体化学

Modern Crystal Chemistry

陈敬中 等 编著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是在教育部研究生工作办公室推荐的研究生教材《现代晶体化学——理论与方法》一书的基础上,与时俱进修改补充完善而成的。

全书共有十四章。系统介绍了晶体化学的形成和发展,晶体几何学理论,倒易点阵及晶体衍射方向,晶体化学基本原理,晶体生长与晶体合成,晶体结构缺陷,准晶体学基础,单质、氧化物及类似物的晶体化学,硅酸盐晶体化学,配合物晶体的设计与合成,几种新颖配合物的晶体化学,纳米材料晶体化学,晶体的X射线分析,晶体的显微分析等。内容安排符合教学要求,富有启发性,有利于学生素质、能力的培养和提高;理论论证科学,实践性也很强,及时、准确地反映了国内外的先进成果。

本书适合结晶矿物学、晶体化学、材料科学、应用化学、应用物理等专业的本科生和研究生学习,也可供有关专业的教学和科研人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

现代晶体化学/陈敬中等编著. —北京:科学出版社, 2010
(现代化学基础丛书: 20)

ISBN 978-7-03-027389-5

I. ①现… II. ①陈… III. ①晶体化学 IV. ①O74

中国版本图书馆CIP数据核字(2010)第077901号

责任编辑:周巧龙 刘 冉/责任校对:朱光光

责任印制:钱玉芬/封面设计:王 浩

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

丽源印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2010年5月第 一 版 开本: B5 (720 × 1000)

2010年5月第一次印刷 印张: 26 3/4

印数: 1—2 500 字数: 520 000

定价: 68.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

《现代化学基础丛书》编委会

主 编 朱清时

副主编 (以姓氏拼音为序)

江元生 林国强 佟振合 汪尔康

编 委 (以姓氏拼音为序)

包信和 陈凯先 冯守华 郭庆祥

韩布兴 黄乃正 黎乐民 吴新涛

习 复 杨芑原 赵新生 郑兰荪

卓仁禧

《现代化学基础丛书》序

如果把牛顿发表“自然哲学的数学原理”的1687年作为近代科学的誕生日，仅300多年中，知识以正反馈效应快速增长：知识产生更多的知识，力量导致更大的力量。特别是20世纪的科学技术对自然界的改造特别强劲，发展的速度空前迅速。

在科学技术的各个领域，化学与人类的日常生活关系最为密切，对人类社会的发展产生的影响也特别巨大。从合成DDT开始的化学农药和从合成氨开始的化学肥料，把农业生产推到了前所未有的高度，以致人们把20世纪称为“化学农业时代”。不断发明出的种类繁多的化学材料极大地改善了人类的生活，使材料科学成为了20世纪的一个主流科技领域。化学家们对在分子层次上的物质结构和“态-态化学”、单分子化学等基元化学过程的认识也随着可利用的技术工具的迅速增多而快速深入。

也应看到，化学虽然创造了大量人类需要的新物质，但是在许多场合中却未有效地利用资源，而且产生了大量排放物造成严重的环境污染。以至于目前有不少人把化学化工与环境污染联系在一起。

在21世纪开始之时，化学正在两个方向上迅速发展。一是在20世纪迅速发展的惯性驱动下继续沿各个有强大生命力的方向发展；二是全方位的“绿色化”，即使整个化学从“粗放型”向“集约型”转变，既满足人们的需求，又维持生态平衡和保护环境。

为了在一定程度上帮助读者熟悉现代化学一些重要领域的现状，科学出版社组织编辑出版了这套《现代化学基础丛书》。丛书以无机化学、分析化学、物理化学、有机化学和高分子化学五个二级学科为主，介绍这些学科领域目前发展的重点和热点，并兼顾学科覆盖的全面性。丛书计划为有关的科技人员、教育工作者和高等院校研究生、高年级学生提供一套较高水平的读物，希望能为化学在新世纪的发展起积极的推动作用。

朱清时

《现代晶体化学》编写人员名单

(以姓氏拼音为序)

陈敬中 陈 瀛 宫斯宁

龙光芝 王贤文 夏 华

中国地质大学（武汉）研究生培养模式与教学改革项目
教育部纳米矿物材料及应用工程研究中心项目
联合资助

前 言

20 世纪是自然科学飞速发展的 100 年，物理学、化学、数学、生物学、地质学等基础学科的发展，促使现代测试分析技术进入高科技的新层次，使人们对复杂的物质世界有了更加深入的认识，对深层次物质结构理论和应用的研究成为重要学科领域。面向 21 世纪，大力培养各方面科学技术人才，是我国高等教育发展的重中之重。

为此，我们编写了《现代晶体化学——理论与方法》一书，并于 2001 年由教育部资助、高等教育出版社出版，教育部研究生工作办公室向全国高校、研究院所推荐此书为研究生教学用书。《现代晶体化学——理论与方法》出版以来，用于研究生和高年级本科生教学实践中，获得了很好的效果。

为及时反映现代科学技术发展的新成果，在原书的经典章节的基础上，对一些不太合理的章节进行了认真修改，形成了《现代晶体化学》一书。为了适应现代化建设对高层次晶体学、晶体化学、固体物理、材料科学、矿物学、宝石学等专业人才的需要，本书注意跟踪世界最新科研成果，总结学科新理论知识，反映学科前沿新成就，同时也体现了作者多年来的科研成果。

本书力求做到理论严谨、结构合理、文字精练、图件清楚，从物质结构的基础理论、基本分类规则和现代测试分析方法上系统地阐述了传统晶体化学向现代晶体化学发展的科学进程，展望了 21 世纪现代晶体化学发展的必然趋势，适应新时代对科学技术人才的要求。

全书包括前言、正文十四章以及参考文献，最后由陈敬中负责定稿。

正文十四章包括：第一章绪论（由陈敬中执笔），内容有晶体学、晶体结构、准晶结构、晶体化学研究与发展、纳米材料晶体化学、物质结构对称新理论。第二章晶体几何学理论（由陈敬中执笔），内容有对称操作、点群、空间格子（点阵）、空间群。第三章倒易点阵及晶体衍射方向（由陈敬中执笔），内容有布拉格定律、倒易点阵、正点阵与倒易点阵的指数变换、六方晶系的指数变换、晶系中正点阵与倒易点阵的单胞参数及晶体学公式。第四章晶体化学基本原理（由陈敬中、陈瀛执笔），内容有晶体化学研究、晶体化学基础、晶体结构变异。第五章晶体生长与晶体合成（由夏华、陈敬中执笔），内容有晶体生长基本理论、晶体生长实验方法。第六章晶体结构缺陷（由陈敬中执笔），内容有晶体

中的缺陷、点缺陷、位错（线缺陷）、面缺陷、晶体表面和界面、晶体缺陷的研究方法。第七章准晶体学基础（由龙光芝、陈瀛、陈敬中执笔），内容有群论基础、晶体与准晶体中点群及极赤投影图、晶体学与准晶体学点群的母子群关系（60 个点群的“家谱”）、纳米微粒多重分数维准晶结构模型。第八章单质、氧化物及类似物的晶体化学（由陈敬中执笔），内容有单质及类似物的晶体化学、氧化物及类似物的晶体化学、复杂氧化物的晶体化学。第九章硅酸盐晶体化学（由陈敬中执笔），内容有硅酸盐矿物的化学组成、硅酸盐的晶体结构特征、硅酸盐矿物的分类、硅酸盐中过渡性晶体结构。第十章配合物晶体的设计与合成（由夏华、陈敬中执笔），内容有常规的溶液法、扩散法、水热及溶剂热法。第十一章几种新颖配合物的晶体化学（由王贤文、陈瀛、陈敬中执笔），内容有功能配位化学研究的前沿方向、功能金属-有机框架化合物的结构性质——拓扑图形、四氮唑配体构筑的蜂巢状（ 4^36^3 ）拓扑构型荧光锌（II）二维金属-有机框架、镧系金属-有机框架（3,4）-结点和（4,5）-结点新型化合物及性能、四核锰（II）簇构造的新型 BN 拓扑金属-有机框架化合物、基于柔性两性离子配体的新颖手性二重穿插 dia 拓扑构型三维金属-有机框架化合物、多元配合物的晶体化学研究意义。第十二章纳米材料晶体化学（由陈瀛、陈敬中执笔），内容有纳米晶体、纳米晶体的多面体形态、纳米晶体的自组装、粒子的溶液相自组装、纳米自组装技术、自组装的纳米晶体性能、模板辅助纳米自组装。第十三章晶体的 X 射线分析（由陈敬中、王贤文、陈瀛执笔），内容有 X 射线分析基础、晶体对 X 射线的衍射、晶体结构的 X 射线分析原理。第十四章晶体的显微分析（由陈敬中、陈瀛执笔），内容有电子光学基础、电子束和物质之间的相互作用、透射电子显微分析、扫描电子显微分析、扫描探针显微镜。

主要参考文献由宫斯宁、陈敬中整理编写。宫斯宁博士负责文字录入、图件整理、文献编辑、书稿校对和其他日常工作。

晶体化学是多种学科专业的基础，与固体物理学、结构化学、配位化学、材料科学、矿物学、宝石学、晶体学、准晶体学、晶体合成、晶体结构、纳米科技、纳米材料学、现代测试分析等学科密切相关。因此，编写一本与时俱进的晶体化学教材是非常必要的。在编写本书的过程中，作者们力求做到：内容符合多种学科教学要求，符合学生认识科学的基本规律，富有启发性，有利于学生能力的培养；结构完整合理，理论和实例配合适当；理论论证科学准确，公式推导及运算正确，结合学科发展联系实际；系统表述教学基本内容，符合学科内在规律；能及时、恰当、准确地反映国内外先进成果，学术思想观点正确，有利于弘扬民族科学文化，体现唯物辩证法；逻辑性强，利于学生素质的提高与培养；内容结构、体系安排均具有明显的特点和一些创新；文字规范，

语言流畅，图文配合得体，图形、符号、单位符合国家标准。

本书的出版得到中国地质大学（武汉）研究生培养模式与教学改革项目和教育部纳米矿物材料及应用工程研究中心项目的联合资助。在此表示衷心的感谢！

陈敬中
2010 年 2 月

目 录

《现代化学基础丛书》序

前言

第一章 绪论	1
1. 晶体学	1
2. 晶体结构	2
3. 准晶结构	3
4. 晶体化学研究与发展	4
5. 纳米材料晶体化学	5
6. 物质结构对称性理论	6
第二章 晶体几何学理论	8
1. 对称操作	8
2. 点群	20
3. 空间格子 (点阵)	23
4. 空间群	28
第三章 倒易点阵及晶体衍射方向	43
1. 布拉格定律	43
2. 倒易点阵	44
3. 正点阵与倒易点阵的指数变换	50
4. 六方晶系的指数变换	57
5. 晶系中正点阵与倒易点阵的单胞参数及晶体学公式	58
第四章 晶体化学基本原理	63
1. 晶体化学研究	63
2. 晶体化学基础	66
3. 晶体结构变异	92

第五章 晶体生长与晶体合成	103
1. 晶体生长基本理论	103
2. 晶体生长实验方法	134
第六章 晶体结构缺陷	140
1. 晶体中的缺陷	140
2. 点缺陷	141
3. 位错 (线缺陷)	145
4. 面缺陷	151
5. 晶体表面和界面	159
6. 晶体缺陷的研究方法	160
第七章 准晶体学基础	162
1. 群论基础	162
2. 晶体与准晶体中点群及极赤投影图	166
3. 晶体学与准晶体学点群的母子群关系 (60 个点群的“家谱”)	171
4. 纳米微粒多重分数维准晶结构模型	174
第八章 单质、氧化物及类似物的晶体化学	184
1. 单质及类似物的晶体化学	184
2. 氧化物及类似物的晶体化学	186
3. 复杂氧化物的晶体化学	191
第九章 硅酸盐晶体化学	202
1. 硅酸盐矿物的化学组成	202
2. 硅酸盐的晶体结构特征	203
3. 硅酸盐矿物的分类	205
4. 硅酸盐中过渡性晶体结构	222
第十章 配合物晶体的设计与合成	242
1. 常规的溶液法	242
2. 扩散法	251
3. 水热及溶剂热法	257

第十一章 几种新颖配合物的晶体化学	262
1. 功能配位化学研究的前沿方向	262
2. 功能金属-有机框架化合物的结构性质——拓扑图形	266
3. 四氮唑配体构筑的蜂巢状 (4^36^3) 拓扑构型荧光锌 (II) 二维金属-有机框架	271
4. 镧系金属-有机框架 (3,4)-结点和 (4,5)-结点新型化合物及性能	278
5. 四核锰 (II) 簇构造的新型 BN 拓扑金属-有机框架化合物	285
6. 基于柔性两性离子配体的新型手性二重穿插 dia 拓扑构型三维金属- 有机框架化合物	290
7. 多元配合物的晶体化学研究意义	295
第十二章 纳米材料晶体化学	296
1. 纳米晶体	296
2. 纳米晶体的多面体形态	297
3. 纳米晶体的自组装	308
4. 粒子的溶液相自组装	311
5. 纳米自组装技术	317
6. 自组装的纳米晶体性能	320
7. 模板辅助纳米自组装	322
第十三章 晶体的 X 射线分析	324
1. X 射线分析基础	324
2. 晶体对 X 射线的衍射	326
3. 晶体结构的 X 射线分析原理	331
第十四章 晶体的显微分析	348
1. 电子光学基础	348
2. 电子束和物质之间的相互作用	357
3. 透射电子显微分析	364
4. 扫描电子显微分析	385
5. 扫描探针显微镜	394
参考文献	404

第一章 绪 论

晶体研究已有 300 多年历史, 经历了晶体形态学、晶体结构学、晶体化学、准晶体学、纳米材料晶体化学、现代晶体化学的漫长发展过程, 它是伴随着数学、物理学、化学、地质学、材料科学及测试分析技术和方法的发展而成长起来的。

1. 晶 体 学

晶体学作为一门科学出现, 科学界公认始于 17 世纪中叶。丹麦斯泰诺 (Steno N, 1638 ~ 1686 年) 奠定了晶体学的基石, 1669 年, 他提出了晶体的面角守恒定律, 奠定了几何结晶学的基础。1688 年, 古列尔米尼 (Guglielmini, 1655 ~ 1710 年) 把面角守恒定律推广到多种晶体上。1749 年, 俄国罗蒙诺索夫 (1711 ~ 1756 年) 创立了物质结构的微分子学说, 从理论上阐明了面角守恒定律的实质。到 1772 年, 法国得利 (Del'lele R, 1736 ~ 1790 年) 测量了 500 种矿物晶体的形态, 写出了著名的《晶体形态学》, 肯定了面角守恒定律的普遍性。从此, 人们了解到晶体晶面的相对位置是每一种晶体的固有特征, 而晶面的大小在很大程度上取决于晶体生长期间的物理化学条件。

1784 年, 法国阿维 (Haüy R J, 1743 ~ 1822 年) 提出了晶体均由无数具有多面体形状的分子平行堆砌而成, 1801 年发表著名的整数定律, 从而解释了晶体外形与其内部结构的关系。他认为晶体是对称的, 晶体的对称性不但为晶体外形所固有, 同时也表现在晶体的物理性质上。

1809 年, 德国魏斯 (Weiss C S, 1780 ~ 1856 年) 根据晶体的面角测量数据进行晶体投影和理想形态的绘制, 确定了晶体形态的对称定律: 晶体只可能有 1、2、3、4 和 6 次旋转对称轴, 而不可能有 5 次和高于 6 次的旋转对称轴存在。这为晶体对称分类奠定了基础。

1830 年, 德国黑塞尔 (Hessel J F C, 1796 ~ 1872 年) 推导出晶体的 32 种对称型 (点群)。到 1867 年, 俄国加多林 (Gadolin A F, 1828 ~ 1892 年) 又用数学方法推导出晶体的 32 种对称型。德国申弗利斯 (Schoenflies, 1835 ~ 1928 年) 创立了以他名字命名的对称型符号 (Schoenflies 符号), 赫尔曼 (Hermann) 和莫

甘 (Mauguin) 创立了国际符号 (HM 符号), 从而完成了晶体宏观对称理论的总结。在对称理论迅速发展期间, 魏斯还确定了晶带定律。魏斯和米勒 (Miller W H, 1801 ~ 1880 年) 分别于 1818 年和 1839 年先后创立了用以表示晶面空间位置的魏斯符号和米勒符号。到 19 世纪末, 由于晶体形态对称理论的迅速发展, 整个几何结晶学理论达到了相当成熟的程度。

2. 晶体结构

19 世纪末到 20 世纪 70 年代, X 射线的发现与应用, 使得晶体形态学进一步发展到晶体结构学, 微观对称理论也日益成熟。晶体的结构被揭示出来, 并在系统完成一大批晶体结构研究的基础上发展建立起了以研究晶体成分和晶体结构及其与物理化学性质关系为主要内容的学科, 即晶体化学。

19 世纪中叶, 在几何结晶学基础上, 借助于几何学、群论方法以及化学、物理学发展所创造的条件, 晶体构造理论得到了进一步发展。在阿维的晶体构造理论的启示下, 19 世纪产生的空间点阵 (或空间格子) 构造理论, 逐渐演化成为质点在空间规则排列的微观对称学说。1855 年, 法国结晶学家布拉维 (Bravais A, 1811 ~ 1863 年) 运用数学方法推导出晶体的 14 种空间格子, 为晶体结构理论奠定了基础。但是, 此理论只能说明晶系中对称最完全的晶类的对称, 而不能解释对称较低的晶类的对称。

俄国费奥多罗夫 (Fedorov, 1853 ~ 1919 年) 圆满地解决了晶体构造的几何理论, 创立了平行六面体学说, 提出了反映及反映滑移等新的对称变换, 于 1889 年推导出晶体构造 (无限图形) 的一切可能的对称形式, 即 230 种空间群, 并发现了结晶学极限定律。此后, 德国申弗利斯等分别推导出相同的 230 个空间群。晶体构造的空间几何理论日趋完善。

19 世纪末, 晶体结构的几何理论已被许多学者所接受。1895 年, 德国学者伦琴 (Roentgen W C, 1845 ~ 1923 年) 发现了 X 射线。1909 年, 德国学者劳厄 (Laue M, 1827 ~ 1960 年) 提出了 X 射线通过晶体会出现干涉现象, 并与弗里德里希 (Friedrich) 等用实验证明了晶体格子的客观性, 劳厄等开创了晶体学研究的新时代。此后, 法国学者布拉格父子 (Bragg W H 和 Bragg W L) 发表了第一个测定的氯化钠晶体结构, 并在一个不长的时期内测定了许多晶体结构, 而且改善了晶体结构测定的理论和实验技术, 从而开拓了晶体结构研究的新领域。从 1909 年 X 射线通过晶体产生衍射效应的实验第一次获得成功以来, 所有已知晶体结构的测定基本上都是用上述方法做出的。

自 1889 年费奥多罗夫推导出 230 个空间群之后, 俄国舒布尼柯夫 (1887 ~

1970 年) 将对称理论向前推进了一步, 1951 年提出正负对称型的概念, 创立了对称理论的非对称学说。随后, 扎莫扎也夫和别洛夫 (1891 ~ 1982 年) 根据正负对称型概念增加了晶体所可能有的对称形式, 将费奥多罗夫 230 个空间群发展为 1651 个舒布尼柯夫黑白对称群。1956 年, 别洛夫又提出多色对称理论的概念, 并探讨了四维空间的对称问题。这些理论在晶体学、晶体化学、晶体物理学领域中得到广泛的应用。

现在, 已可利用高分辨率透射电子显微镜来直接观察晶体的内部结构了。1932 年, 德国鲁斯卡 (Ruska) 等试制出世界上第一台电子显微镜, 在早期, 人们主要是利用电子显微镜的放大能力, 观察一些细微晶体的形态。后来在电子显微镜中安装了观察晶体的电子衍射图像装置, 使人们在 20 世纪广泛运用电子衍射花样及显微图像来研究晶体的微细结构一类现象。1956 年, 英国科学家门特 (Menter) 在酞菁铂晶体上观察到了晶面间距为 1.19nm 的 $(20\bar{1})$ 面的晶格像。逐步建立了高分辨成像理论, 发展了高分辨透射电子显微镜。现在, 它们的分辨率已优于 0.1nm。从而可以直接观察晶体中的晶格像、结构像, 甚至于可以观察到晶体中的原子像。用 500kV 超高分辨电子显微镜拍摄的氯代酞菁铜晶体的分子像, 清晰地显示出氯代酞菁铜的分子, 并且在分子内可以看出铜原子像、氯原子像等。

X 射线衍射法是根据晶体试样中所有晶胞对 X 射线散射, 以散射波叠加后得到的平均效应进行分析的。例如, 1mm^3 单晶试样中约有 10^{17} 个晶胞, 测定晶体结构是根据 10^{17} 个晶胞的散射波总和来分析的, 所以测得的结构只能是一种“平均结构”, 也就是说, 它是一种晶胞级上的“平均结果”。电子显微镜, 尤其是高分辨电子显微镜则不同, 它可以直接在 0.1nm 的分辨率上来观察和研究有关结构现象, 结果真实地反映了晶胞级上的各种微细结构和微观现象。

自 20 世纪 70 年代以来, 电子显微镜研究方法已经成为物质超微结构研究的基本方法。

3. 准晶结构

晶体对称理论诞生近两个世纪以来, 一直排斥 5 次或 6 次以上对称轴存在。1984 年 10 月, 肖特曼 (Shechtman D) 等在美国物理评论快报上发表的“长程定向有序而没有平移对称的金属相”一文中报道了 Mn-Al 合金中发现 5 次对称轴, 整个科学界立刻为之震动。中国科学院郭可信等也于 1985 年春在 $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{Ni}$ ($x=0.1\sim0.3$) 急冷合金中发现了具有 5 次对称的准晶, 并用朗道相变理论解释准晶生长。从此, 5 次对称轴作为 20 世纪 80 年代的重大科学发现载入科学史册。

准晶体科学，从此破土而出。

5 次旋转对称这个禁区被突破后，8、10、12 次旋转对称准晶相继被发现。这些准晶都属于二维准晶，在主轴方向呈周期性平移对称，而在与此轴垂直的二维平面上呈准周期分布对称。除了二维与三维准晶外，一维准晶也应存在。这是一种二维层在其法线方向的准周期堆垛结构，准晶的存在具有普遍性。

陈敬中等认为晶体和准晶体中共有 12 个晶系，其中晶体有 7 种晶系，准晶体有 5 种晶系；60 个点群，其中晶体有 32 种，准晶体有 28 种；89 种单形，其中晶体有 47 种，准晶体有 42 种。

准晶体的第一个模型产生于堆砌数学。Mackay A L 等于 1982 年提出了 Penrose 模型，后来根据 Penrose 模型计算出的衍射峰图与 Shechtman D 等（1984）的准晶结构研究结果很吻合。Shechtman D 等（1984）提出了二十面体的准晶结构是由无规则连接的二十面体原子团簇组成的，Stephens P W 等称其为准晶结构的二十面体玻璃模型。它消除了匹配规则的必要性，对准晶体生长提出了一个较合理解释，无序现象很相似于衍射图中峰加宽显示的无序现象。尽管这种模型在推测衍射图方面获得较满意的效果，但在解释准晶体结构无序方面问题太多。无规堆砌模型综合了 Penrose 模型和二十面体玻璃模型中一些优点。认为 Penrose 模型的严格匹配规则并非必须遵守，只要在结构中没有限隙就可以不遵守那些规则。无序堆砌模型推测出非常完全的明锐衍射峰，就像其更有序的同类 Penrose 模型一样。

准晶结构的理论模型有 Penrose 模型、玻璃模型、无规堆砌模型和微粒分数维模型。

1992 年，陈敬中提出的“纳米微粒多重分数维准晶结构模型”更为符合凝聚态物理、分数维几何学、纳米科学、晶体结构和晶体化学等多种理论，是一种理想的准晶结构模型。作为特邀代表，陈敬中于 2002 年在法国国际准晶结构理论大会上以此为内容做了主题发言。

4. 晶体化学研究与发展

晶体化学，是研究晶体成分与晶体结构以及它们与晶体的物理、化学性质之间关系的科学。伴随着物理学、化学、晶体学、晶体结构、X 射线分析、电子显微分析、扫描隧道显微分析等的飞速发展，大量周期晶体结构测定完成，同时准周期、非周期结构、物质结构的缺陷、纳米材料结构等研究越来越深入，现代晶体化学已成为一门重要的基础科学。

现代晶体化学主要研究内容：从天然晶体结构研究，到合成晶体结构研究；