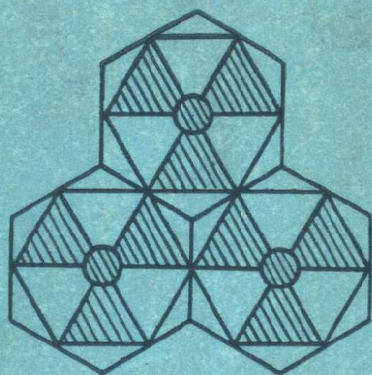




G·C·特里冈艾亚特

矿物的多型性

地 质 出 版 社

矿物的多型性

G. C. 特里冈艾亚特 等著

罗谷风 译

李继亮 校

地质出版社

496655

内 容 简 介

本书编译了两篇有关晶体及矿物多型性的文章。一篇较全面系统地阐述了关于多型性各方面的问题，其中包括了大量近年来研究的最新成果。可以使读者了解有关晶体及矿物多型性的全貌概况。另一篇是《国际矿物学会—国际结晶学联合会联合命名委员会报告》，它规定了多型性的定义及统一的符号表示法，并列出了某些有代表性的矿物族多型实例。

本书可供晶体物理学、晶体化学和矿物学工作者及高等院校有关专业师生参考。

矿物的多型性

G. C. 特里冈艾亚特 等著

罗谷风 译

李继亮 校

*

地质部书刊编辑室编辑

地质出版社出版

(北京西四)

地质印刷厂印刷

(北京安德路47号)

新华书店北京发行所发行·各地新华书店经售

*

开本：787×1092¹/₃₂·印张：3³/₄·字数：83,000

1981年3月北京第一版·1981年3月北京第一次印刷

印数1—2,480册·定价0.90元

统一书号：15038·新587

译者前言

多型性是一种物质以两种或两种以上不同的层状晶体结构存在的现象，它与一般同质多象的不同在于其结构中的层都是相同的，至少也是相似的，不同的多型只是在层的堆垛顺序上有所不同。所以，多型性也就是一维的同质多象。但是多型性与同质多象在物理上却是性质完全不同的两种现象，应当把这两者明确地区分开来。不过一直到目前为止，在有些文献中仍把多型性也称为同质多象，这是不十分合理的。

多型性现象虽然早在1912年就已发现，但对它进行广泛深入的研究则主要是从五十年代初开始的。最近二十年来的研究表明，在多型的形成中，堆垛层错起着决定性的作用，多型性看来是层状结构晶体的一种固有的特性，而且从不是很严格的意义上讲，在诸如某些辉石、角闪石、沸石等非层状结构的晶体中，同样也存在着多型。所以，多型性实际上是晶体中相当普遍的一种现象。对于多型性的研究，在结晶学、固体物理学、固体化学、矿物学、地质学和冶金学等领域中，无论在理论上或是实用上都具有重要的意义和广阔的前景。

这本小册子编译了两篇有关多型性的文章。《层状结构晶体中的多型性和堆垛层错》一文是《Crystallography and Crystal Chemistry of Materials with Layered Structure》一书中专门讨论多型性的一篇综合性文章。它较全面系统地

1971/9/18/02

阐述了关于多型性的各方面问题，其中包括了大量近年来研究的最新成果，但基本上没有涉及到数学推导和计算，也没有引用过多的物理上的专门概念。此文主要的不足之处是，不少地方介绍得不够详细，但作为一篇篇幅有限的概括性文章而言，这又是在所难免的，好在它列出了详尽的参考文献目录，有助于弥补这一不足。此外，此文讨论的对象主要是人工合成的晶体，特别是 CdI_2 晶体的多型性，涉及到天然矿物晶体者很少，这对于从事矿物和地质工作的人们来说，不能不是一个缺憾。不过，就了解多型性全貌概况的目的而言，这篇文章则是比较适宜而且有价值的。

另一篇文章是《国际矿物学会—国际结晶学联合会联合命名委员会报告》。它主要是针对七十年代以来由于多型性现象所引起的问题而提出的一些建议，包括多型的定义及其统一的符号表示法等，同时还列出了某些有代表性的矿物族多型的实例。它正好从两个方面对前一篇文章提供了一个权威性的补充说明。

上述前后两篇文章的译稿分别承我校物理系晶体物理教研室冯端教授和地质系岩矿教研室季寿元副教授作了全面细致的校阅；此外，岩矿教研室薛纪越同志也对译稿提出了宝贵的修改意见。在此，译者谨对他们表示深切的感谢。

罗谷风

一九七九年三月十六日于南京大学

层状结构晶体中的多型性 和堆垛层错

G. C. 特里冈艾亚特 (Trigunayat)

(印度德里大学物理与天体物理学系)

阿吉特·拉姆·弗马 (Ajit Ram Verma)

(印度国立物理研究室)

1. 多 型 性

多型性 (polytypism) 现象起源于一种固体结晶成多于一种变体 (modification) 的能力, 这些变体本质上具有相同的化学组成, 但是它们在单位晶胞中层的数目和堆垛方式上有所不同。这些层可以具有组合的特性, 并且全都是等同的。它们按固体中的紧密堆积面一层盖一层地堆垛。这些变体称为该特定固体的“多型” (polytype), 或简称为“型”

(type)。由于组元层 (constituent layer) 在结构上都是等同的, 因而一种固体的各个多型, 它们在层的堆垛平面内都具有相同尺寸的单位晶胞。而在垂直于层的堆垛平面方向上, 晶胞的尺寸 (通常称为多型的晶胞高度) 则是变化的。此种变化可以非常之大, 在某些物质中其变化幅度可从几个埃 ($\text{\AA}$) 到几千埃。由于层的同一性而引起的另一个结果

是，一种物质的所有多型，它们的晶胞高度必然都等于单个层的基本重复周期的整数倍。一种多型物质通常结晶成一种小周期的“基本的”或“理想的”结构，称之为该物质的最普通的多型。多型物质只是偶而结晶成其他的多型，且除了少数例外，它们的周期都比普通型来得高。这些较高型出现的频率取决于多型性的程度，后者在不同的物质中是不一样的。有时，除了最普通的多型而外，还可以有一种或几种比其他多型较为经常出现的多型。通常称它们为次最普通多型，第三最普通多型，等等。

1.1. 历史概况

在所有的多型物质中，普通多型的占优势出现，有遮蔽了其他多型存在的倾向。这似乎是造成长时间内阻碍发现多型现象的主要原因，它同样也是阻碍这一领域早期探索的主要原因。直至1912年，到鲍姆豪埃尔 (Baumhauer)^[1] 通过光学研究，在六方的6层型最普通多型以外发现了碳化硅的两种新的多型以前，多型现象一直未为人们所知道。其后鲍姆豪埃尔又通过X射线衍射的研究确认了它们的存在^[2]。他还提出，多型的出现与它们的颜色有关。一直到大约四十年代中期为止，继鲍姆豪埃尔的发现之后，在揭露多型生长的本性方面并未取得任何较重要的或一致的成果。不过，在此期间进行了少数断断续续的研究，用X射线衍射和电子衍射法发现了碳化硅另外的几种多型，还发现了 CdI_2 、 PbI_2 、石墨等的几种多型^[3,4]。凭借光谱化学和X射线衍射的证据，还探索了多型生长与多型的杂质含量及结晶速率间的相互关系。

在文献中，用“多模式性” (plurimodism)^[5]、“超周期性” (superpreiodicity)^[6] 以及一般性的术语——同质多

象现象 (polymorphism)^①等不同名称,来称呼多型性现象。前两个名称并未普遍使用,而第三个名称则沿用了下来,这大概是因为在结晶学中同质多象现象是一种众所周知的现象,为时已有两个多世纪。甚至在诸如维科夫 (Wyckoff)^[7]、伊文思 (Evans)^[8]等人的一些权威的原著中,也分别使用同质多象现象和同质多象 (polymorph) 的术语来描述多型性和多型。这种用法不是十分恰当的,因为近二十年来在理论上和实验上所做的广泛研究已清楚地揭示出,多型性在物理上与同质多象现象不一样。一种物质能以两种或两种以上具有不同晶体结构的形式存在时,即被说成是同质多象的。硫化锌是一个常见的实例,它以立方形式 (β -ZnS, 闪锌矿) 和六方形式 (α -ZnS, 纤锌矿) 出现。在 1020℃ 左右前者可逆地转变成成为后者。许多物质的同质多象超过了两种,例如石英有多达六种的不同形式,它们在不同的温度范围内稳定或准稳定。各种物质的同质多象并不总是直接从结晶作用过程中获得的。在许多情况下,它们是固体状态下相转变的结果。因此,凡是在一种物质的晶体结构上所能遇到的每一种可能的差异 (均匀的变形除外),都应当看成是同质多象现象^[9]。所以从结构上可以合理地把多型性看成是同质多象现象的一种特殊情况,称之为“一维的同质多象现象” (one-dimensional polymorphism)。结构上的相似性也由能量上的考察所证实。一个具体的例子是,在硫化锌的两个同质多象形式,即立方的 β -ZnS 和六方的 α -ZnS 中,锌原子和硫原子的最近邻环境都是一样的,只当考虑次近邻时,它们的结构间才出现差异。所以 ZnS 的这两种形式在势能上的差异

① 即多形性、多晶型现象或同质异象现象,但也有人译为“多型现象”的——译注

是微不足道的，其能量差异几乎无法进行计算。环境上的相似情况也存在于硫化锌的多型(α 形式是多型的，到目前为止其已知的多型超过 150 种)中，这些多型是由立方堆积和六方堆积以各种各样的比例混合而成的。然而，与多型性不一样，根据热力学能够相当充分地、至少是定性地了解同质多象现象。与同质多象转变有关的最常见的物理因素是温度和压力的变化。因此，同质多象转变在许多方面都相似于从固态到液态或者从液态到气态的变化；后两种变化是一级相变，伴随有体积的突变以及潜热的放出或吸收，并遵守吉布斯相律 (Gibbs phase rule) 和克劳修斯-克拉珀隆方程 (Clausius-Clapeyron equation) (不过在一个重要的方面它们确乎有所不同：物态的变化几乎是瞬时的，同质多象转变的速度则各不相同，从接近于零一直变到无穷大，因为这种转变涉及到结构上键的破裂或重新排布)。单独考虑压力的效应时，如所预期的那样，压力越高，所产生的结构其密度和配位也越高。温度变化的效应则较为复杂，但是对于只涉及到最近邻的配位有所变化的转变而言，可以说，较高的温度引起配位较低而对称较高的结构。在多型中，未曾发现过有这样的物理因素控制它们的形成。一种物质的多型看来似乎是在相同的温度、压力条件下形成的。事实上，经常看到一种以上的多型共存于同一晶块中。仅仅对于碳化硅的几种小周期多型，曾怀疑它们有某种含糊的温度-结构关系存在。所以，尽管同质多象现象与多型性两者在结构上有相似性，还是应当把它们看成是物理上不同性质的两种现象。

1.2. 新近的进展

在四十年代中期到五十年代初期，对碳化硅的几种新的多型作了形态和结构方面的详细研究^[10~12]。五十年代初期

前后，关于晶体生长动力学的概念曾经历了一个根本的变化。实际晶体的生长必然会包含有缺陷，这一点已为人们所认识^[13]，而弗兰克（Frank）等人则发展了他们有名的关于晶体生长的螺旋位错理论，按照这一理论，甚至在低过饱和的情况下，通过晶体中的螺旋位错在表面上所造成的阶梯，晶体也能生长^[14]。由此长成的晶体将不会具有平坦的分子平面，而是呈一种螺旋形平台状的表面。随着这一理论的出现，对于该理论所预期的晶体表面上的生长螺旋纹进行了深入细致的探究。弗马（Verma）^[15,16]和阿梅林克斯（Amelinckx）^[17,18]获得了显著的成就，他们用相衬显微镜观察并拍摄了SiC底轴面上形形色色漂亮的生长螺旋纹。弗马还用多光束干涉仪精确地测量了螺旋阶梯的高度。他发现阶梯的高度等于用X射线测定的该晶体单位晶胞的高度，这就说明螺旋纹确实起源于螺旋位错。有关这些发现以及其他晶体上的生长螺旋纹的详细报导，可在弗马所著的书中找到^[19]。根据实验的结果，弗兰克^[20]对多型性现象提出了一种以晶体生长的螺旋位错模型为基础的、惊人而又简单的解释，它宣告了在此领域中广泛研究的开始。在其后几年中，不仅在该现象的理论研究方面，而且也在实验研究方面，都看到了它们的突飞猛进。业已发现许多物质是多型的。它们的清单中包含了丰富的品种，而且包括了具有不同键型的化合物，例如原子间以离子键为主的和以共价键为主的等等不同键型的化合物。在人工生长的晶体和天然产出的晶体中，都已找到了多型现象的存在。已发现了某些物质的大量多型。从理论的角度来看，一种化合物结晶成其记忆力^①延续达几千个埃的众

① 指高周期的多型中，层的堆积顺序在经过几千个埃的距离后又周期性地重复原来顺序的能力——译注

多变体的倾向性，现已被认为是主要的难题，迄今为止，至少已提出了七种不同的多型性理论。此现象的产生已被归因于各种各样的原因，诸如热力学因素，晶格振动，二级相变等等。它虽然还有待于最后的解答，但图景已变得越来越清楚了，为解决这一难题而付出的极大努力已经得到报偿。实验上的发现业已表明，堆垛层错 (stacking fault) 和位错在多型的生长中起着决定性的作用。除了在对这种现象的研究中所包含的理论意义外，此项研究有希望在固态物理学、固态化学、地质学和矿物学中得到有益的应用^[4]。新近在多型的硫化锌晶体中所做的X射线貌相学的研究，已揭示出存在着结晶学上完善的区域，它对于基本的位错理论具有重大的意义。

根据已知多型物质的清单来判断，多型性看来局限于紧密堆积和层状结构的固体中。在这些结构中，如果试图把一个层迭置于另一个层之上，则可以有不止一种的方式来完成其某一原子的第一级配位，即：(i) 由层的立方紧密堆积构成，(ii) 由层的六方紧密堆积构成。单质的结构通常就是这样。所以，在一种物质中，由等同的层以不同的堆积方式所组成的多型，都具有相同的第一级最近邻关系。它们仅仅在第二级或更高级的配位上有不同，并因而在它们的势能上也只有无足轻重的差异。在本文中，我们将仅仅限于详细地描述层状结构的多型性，其他的多型结构只在有必要和有关的时候才作简要的叙述。在早些时候，已经发表了一本论及所有已知多型物质的书^[3]和四篇评论文章^[4, 21~23]。另一篇单独涉及到碳化硅多型性的文章^[24]也已在过去发表。

2. 多型的描述及其鉴定

由于在一些化合物中存在着众多而且紧密有关的多型，因而导致了許多符号设计方案的演变。因为多型性是通过紧密堆积结构和层状结构来体现的，并且所有同一类的层在结构上都是等同的，因而通常只要列举出单位晶胞中层的数目和它们的相对位置，就足以得出一种表示方法了。在文献中所提出的和应用的各種重要的表达形式将在下面叙述，同时还提供了用于鉴定多型的X射线方法的说明。

2.1. 基本的 ABC 标志法

通过二维层的排列来描述呈三维紧密堆积的晶体结构，这是一种众所周知的经典方法。球体的紧密堆积可分解为等同的层，它们可以占据A、B和C三种可能的位置^①，这三种位置通过 $\pm (1/3, 2/3)$ 的平移（相当于 $\pm 60^\circ$ 的旋转）而相互关联。这些层本身呈紧密堆积，层内的每个球均与围绕它的其他六个球相接触，没有两个相继的层能够占据相同的可能位置。一个多型由其单位晶胞中层的堆垛顺序来规定。化合物的多型虽然是由不止一种的原子组成的，但只要规定一种原子的堆垛顺序就够了，因为一种化合物的不同多型都是由等同的结构单位构成的，只是这些结构单位的数目和排列不同而已；其他原子层的位置都可以根据晶体的对称推导得出。这样，碘化镉的四层多型可以单独根据碘原子的堆垛顺序而表示为ABCB。镉原子位于由较大的碘原子组成的紧密堆积层之间，存在于相继的两个层之间的八面体

① 指球体在密置层平面上的投影位置，见图13——译注

空隙中，如果镉原子的位置也想要予以指出的话，其顺序则写作 $(A \gamma B)(C \alpha B)$ ，在此希腊字母指示阳离子的位置。根据对 ABC 顺序的了解，能够容易地算出原子在单位晶胞中的空间位置，而上述这种 ABC 顺序对于给定的一种多型而言是特征性的。 ABC 标志法以此种方式为不同的多型结构提供了一种完整而明确的表示方法。不过，它并不直接揭示晶体的对称，而且对于高周期的多型来说，它还变得过于繁杂。

2.2. 其他的符号设计方案

X射线衍射方法能够快速测定单位晶胞的高度，并进而测定单位晶胞中的层数。此外，在同一过程中通常还能查明多型的晶体对称。因此，对于由X射线衍射方法鉴定出来的多型，一种简便的表示方法是在层的数目字后面跟上一个指示空间格子类型的适当字母，例如具有六方对称的四层的 CdI_2 多型即被标记为 $4H$ 。一般说来，一个六方的 n 层多型表示为 nH 。这一符号体系是由拉姆斯代尔 (Ramsdell) 和科亨 (Kohn)^[12] 提出的，一般通称为拉姆斯代尔符号。他们使用字母下标，例如 nH_a 、 nH_b 等等，以区别晶胞大小和对称都相同而层的堆积顺序有所不同的多型。不过，如在下一节中所讨论的，最好是利用数字下标，例如 nH_1 、 nH_2 等等。

拉姆斯代尔符号虽很简明，并且还表达了空间格子的对称，但与 ABC 符号不一样，它并不揭示出层与层之间的关系。其他的符号设计方案的目标，即在于以各种简洁的方式来表达这一关系。奥特 (Ott)^[25] 首先作了尝试，他按照单位晶胞中某一类层 (A 、 B 或 C) 之间的间隔序列来表达多型结构。这样， CdI_2 中其 ABC 顺序为 $ABACBCBACACB$ 的菱

面体格子的 $12R$ 多型, 按其间隔序列则表示为 $(2523)^{\text{①}}$ 。但是, 这种符号不适用于表示六方的多型, 因为沿着通过 $A(0, 0, 0)$ 、 $B\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\right)$ 和 $C\left(\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, 0\right)$ 的三根直立轴, 它们的间隔序列是不一样的。此外, 对于晶胞尺寸较大的多型结构来说, 符号将逐渐地变得不太简便, 尽管它比 ABC 符号要来得简短些。

其余的符号体系是利用相邻原子层的相对位置来设计的。如前所述, 层的 A 、 B 、 C 三种方位是相互有关的, 因为通过在平面本身内平移 $\pm(1/3, 2/3)$ 或旋转 $\pm 60^\circ$, 可以从一种方位变换为其他的任何一种方位。相应地, 能够按 $(A \rightarrow B \rightarrow C)$ 循环和 $(A \rightarrow C \rightarrow B)$ 反循环这两种一般类型来排列的此种变换, 可以设想以两种不同的途径来实现, 即如同哈格 (Hägg)^[28] 所设想的通过平移, 或者如弗兰克^[20] 所采用的借助于旋转这样两种途径来实现它。哈格用 $+$ 和 $-$ 的记号, 弗兰克则用 Δ 和 ∇ 的记号, 分别来表示循环和反循环的变化, 例如 $ABAB\cdots$ 结构即用 $+-+-\cdots$ 来指示。单位晶胞中 Δ 的和 ∇ 的 (或 $+$ 的和 $-$ 的) 顺序被制定用来表示多型。对于菱面体的多型而言, 这为符号提供了某种简洁性, 因为在菱面体多型的单位晶胞中, 相同的顺序都重复三次, 例如 CdI_2 的 $12R$ 多型为 $(\Delta\nabla\nabla)_3$, 但对于六方的多型则并无便利之处, 其记号的数目仍然与 ABC 顺序中层的数目相同。然而, 如果与一种接续记号合在一起, 并以一个接一个的数码来表达时, 符号即可得到大大的简化, 例如 $4H$ 表示为 (22) , $12R$ 表示为 (13) 。这一实用的符号设计方

① 因为 $\overline{A} B \overline{A} C B C B A C A C B$ ——译注
 $\leftarrow 2 \rightarrow \leftarrow 5 \rightarrow \leftarrow 2 \rightarrow \leftarrow 3 \rightarrow$

案是由日丹诺夫 (Zhdanov)^[27]发展起来的。如同拉姆斯代尔和科亨^[12]所首先指出的, 记号的顺序性还代表了 (1120) 面中的原子在几何上的曲折顺序, 因为 (1120) 面包含了位于其上的所有三种原子位置 A 、 B 和 C 。

波林 (Pauling)^[28]、维科夫^[7]和雅戈德任斯基 (Jagodzinski)^[29]曾各自独立地使用了一种符号体系, 此符号体系考虑的是, 在一个特定层的两边, 与之紧邻的两个层彼此间的相对位置。如果位于一个层两侧的那两个层, 它们的相对位置是一样的, 例如为 BCB , 则以“ h ”来标记它。如果两边层的方位是不同的, 例如为 ACB , 则将它记为“ c ”。这两个记号来源于众所周知的层的六方紧密堆积方式 ($ABAB\cdots$) 和立方紧密堆积方式 ($ABCABC\cdots$)。这样, 其 ABC 顺序为 $ABCB$ 的 $4H$ CdI_2 多型, 便表示为 $(hc)_2$ 。维科夫和雅戈德任斯基分别采用 H 、 C 和 h 、 k 来代替记号 h 、 c 。

单个的单斜云母层具有特殊的结构对称, 这导致了符号设计方案的公式化, 它是为了描述云母的多型而专门创造出来的。此种对称性允许单个的单斜云母层以六种可能的取向迭加到相邻的层上去, 这包括有关的层绕垂直于层的轴线旋转 0° 、 $\pm 60^\circ$ 、 $\pm 120^\circ$ 或 180° 。这样, 一个 n 层的云母多型就可以用其组元层的旋转顺序来表示。兹维亚金 (Zvyagin)^[30]将六种可能的取向标记为 A 、 B 、 C 、 $\bar{A}$ 、 $\bar{B}$ 、 $\bar{C}$, 旋转是按相对于一个 C 取向的“标准”层 (假定它是安置了单斜坐标系的单个的层) 来想象的。一个在其单位晶胞中有 n 个层的多型, 用包含 n 个字母的一个系列来标记它, 系列的第 j 个字母表示第 j 个云母层的兹维亚金取向。例如一个具有三斜格子的云母的四层多型, 它在拉姆斯代尔符号中表示为 $4Tc$, 而在这一体系的符号中则标记为 $\bar{C}\bar{C}\bar{A}\bar{A}$, 一个接一个

的字母用来表示层的堆垛顺序，叫做兹维亚金取向的堆垛记号 (Zvyagin oriented stacking symbol)。罗斯 (Ross) 等^[31]新近曾提出了一个修改的符号设计方案，设想用相邻层之间的相对旋转来代替以“标准”层为基准的旋转。 0° 、 $\pm 60^\circ$ 、 $\pm 120^\circ$ 和 180° 这六种可能的旋转分别用 0 、 ± 1 、 ± 2 和 3 的数码来代表。在这里，上述四层的三斜多型表示为 $4Tc[0132]$ ，这样的符号称为多型的矢量堆垛符号 (the vector stacking symbol)。此处的 Tc 代表多型的三斜对称。

2.3. 各种符号的适用性

遗憾的是，同一种符号方案在不同的作者使用时有所变异，导致了文献中不必要的混乱。鉴于最近有关多型性工作的著作迅速增加，迫切希望有一种为所有作者都遵循的一致样式，以避免混乱并在具体问题中获得最完善的表示法。下面的简短说明就包含了有助于达到这一目标的建议^①。

对于表示晶胞大小已知但晶体结构尚未测定的多型来说，拉姆斯代尔符号是最方便的。晶格的对称，即立方的 (cubic)、四方的 (tetragonal)、正交的 (orthorhombic)、六方的 (hexagonal)、菱面体的 (rhombohedral)、单斜的 (monoclinic) 和三斜的 (triclinic) 对称，可以分别用固有的缩写 C 、 Tl 、 O 、 H 、 R 、 M 和 Tc 来指示。为了以后在符号上的一致性，使用任何其他字母记号的情况，例如用字母 T 代表具有三方对称的六方多型^[32]^②，应当停止。不过在晶格的

① 国际矿物学会和国际结晶学联合会的联合命名委员会于 1977 年 8 月提出一份报告，推荐了多型的两种符号体系，它们与此地描述的符号有一些不同。见本书第 103~112 页——译注

② 指三方晶系结构中其单位晶胞具有 P 格子而不是 R 格子的多型——译注

对称未能鉴定的情况下,可用一个一般的记号 L 来表示“层”(layer),例如 $72L$ 用以描述一个 72 层的多型。较早有些作者,如布拉夫曼(Brafman)等^[33],曾使用这种符号来标志既有六方对称的又有菱面体对称的所有硫化锌多型。一种物质的两种多型,如果具有同样的晶胞大小和对称,仅层的排列不同时,宜用数字下标来加以区分,例如 nH_1 、 nH_2 等,以代替由拉姆斯代尔和科亨^[12]原来提出的字母下标,即 nH_a 、 nH_b 等。鉴于在某些物质中已发现了为数甚多的具有同样晶胞大小的多型,例如曾报导过有 24 种 20 层的 CdI_2 多型,上述这点就成为很必要的了。在这一点上,进一步建议:下标的使用可限于晶体结构已知的多型,因为只有这些结构才具有确定不变的本性,表示结构未知的多型时可不加任何下标,例如 nH 。

日丹诺夫符号是简洁的,并适当地保存了层的相互关系。因此,用来表示晶体结构已知的多型是非常合适的。但是在此必须小心,个别情况下会遇到两个或几个日丹诺夫符号,乍看起来它们似乎是代表了同一个多型的,但当展开成为它们各自的 ABC 顺序后,实际上却证明它们代表了不同的多型。例如,符号 (2321) 和 (1232) 初看起来似乎标志着相同的 CdI_2 多型,但当转换为它们的 ABC 顺序,就是 $(A\gamma B)(C\alpha B)(A\beta C)(A\gamma B)\cdots$ 和 $(A\gamma B)(A\beta C)(A\gamma B)(C\alpha B)\cdots$ 的时候,就明显地看出这是代表了两种不同的晶体结构。这也从根本上强调了 ABC 符号的重要性,这种符号是毫不含糊的,所以在可疑的情况下,特别是在为了确定多型的晶体结构而推测其原子排列的可能模式时,应当始终使用这种符号。

在考虑到层与层之间相互作用的问题中, hc 符号是有价