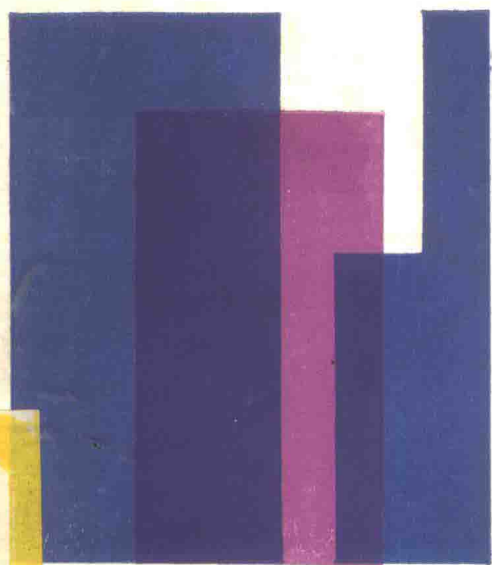


高等学校试用教材

# 结晶学

翁臻培 周志朝 李中和 编



中国建筑工业出版社

本书是为无机非金属材料类专业编写的基础理论教材。内容以几何结晶学为主，同时也介绍了晶体构造的几何规律和晶体生长的基本理论。书中突出了晶体投影部分，注意联系专业实际，但对其他专业的师生和从事材料科学和工程的有关科技人员也有参考价值。

高等学校试用教材

结 晶 学

翁臻培 周志朝 李中和 编

\*

中国建筑工业出版社出版(北京西郊百万庄)  
新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售  
中国建筑工业出版社印刷厂印刷(北京阜外南礼士路)

\*

开本：787×1092毫米 1/16 印张：10½ 字数：256 千字

1986年7月第一版 1986年7月第一次印刷

印数：1—3,700册 定价：1.45元

统一书号：15040·4993

## 前 言

本教材是根据1982年10月国家建材局召开的高校无机非金属材料类专业教材编审委员会工作会议所确定的编审原则和1983年4月该编审委员会所属的“基础理论”编审组审定通过的《结晶学》教学大纲进行编写的。

编写本教材的目的在于：使学生掌握结晶学的基础知识；认识晶体宏观形态与微观结构的本质联系；通晓晶体的分类、晶体的投影、结晶符号和晶体生长的基本理论。

鉴于本门课程为本专业的基础理论课，它与本专业的后续课程——《矿物岩石学》、《无机材料物理化学》、《无机材料结构基础》和《材料工艺学》等既有密切的联系，又有其相对的独立性。因此，本教材的编写除了反映本专业实际需要的内容以外，又保持了本课程自身的特点和系统性。

本教材供无机非金属材料类专业（包括无机材料科学、无机材料工程和无机材料科学与工程应用）应用，以几何结晶学为主，同时讨论晶体构造的几何规律和晶体生长的基本理论。本课程计划讲授36学时，安排五次实习，每次实习2学时，总共46学时。其它专业采用本教材时，可以按专业的需要进行取舍。

本教材由上海科技大学翁臻培主编，参加编写的有浙江大学周志朝和上海科技大学李中和，他们分别编写二、七、八章和四、五、六章，其余部分由主编完成。全稿经主编统一修改后，由国家建材局科教司组织审定，华南工学院王天颐教授担任主审，参加审稿的还有华东化工学院褚培南教授，华南工学院杨兆雄和赵子衷讲师以及同济大学冯铭芬讲师。书稿还经武汉建材学院张冠英副教授审阅和修正。在编写过程中，得到了浙江大学丁子上教授的支持，上海科技大学邬树皋讲师和曹连初讲师也为本教材的编写提出了许多宝贵的意见，教材插图的描绘工作承上海社会科学院情报研究所承厚浩助理研究员协助完成，在此一并致谢。

限于我们的水平和时间，书中可能还会有许多不足之处，热诚地欢迎大家批评指正。

编 者

一九八四年十月于上海

# 目 录

绪论 .....	1
一、结晶学及其研究内容 .....	1
二、结晶学发展简史 .....	1
三、结晶学与无机材料学的关系 .....	4
第一章 晶体与非晶体 .....	6
第一节 晶体 .....	6
一、对晶体的认识过程 .....	6
二、晶体的准确含义 .....	7
三、晶体的分布 .....	8
第二节 晶体的内部构造 .....	8
一、空间格子及其构成规律 .....	8
二、空间格子和格子构造 .....	10
第三节 晶体的基本性质 .....	10
一、晶体的自限性 .....	10
二、晶体的均一性 .....	10
三、晶体的异向性 .....	11
四、晶体的对称性 .....	11
五、晶体的稳定性 .....	12
第四节 非晶体 .....	12
一、非晶体的概念 .....	12
二、非晶体与晶体间的关系 .....	12
第二章 晶体生长的基本规律 .....	14
第一节 晶体形成的方式 .....	14
一、物质状态和结晶作用 .....	14
二、由气相直接结晶成晶体 .....	15
三、由液相结晶成晶体 .....	15
四、由固相结晶成晶体 .....	16
第二节 晶体的发生和成长过程 .....	19
一、一般概念 .....	19
二、熔体中晶核的形成 .....	19
三、晶体的成长过程 .....	21
第三节 晶面生长速度和晶体生长速度 .....	23
一、晶面生长速度和布拉维法则 .....	23
二、晶体生长速度对实际晶体的影响 .....	24
第四节 影响晶体生长的环境因素 .....	25
一、温度的影响 .....	25

二、浓度的影响	26
三、杂质的影响	26
四、粘度的影响	27
五、重力的影响	28
六、压力的影响	28
七、位置的影响	29
<b>第三章 面角守恒定律及晶体测量和投影</b>	<b>30</b>
第一节 晶体的面角守恒定律	30
第二节 晶体的测量	32
一、晶体测量的意义	32
二、晶体测量的方法	32
第三节 晶体的投影	34
一、球面投影的概念	35
二、极射赤平投影	35
三、心射极平投影简介	38
四、极射赤平投影和心射极平投影的比较	39
第四节 吴氏网及其应用	39
一、吴氏网的制作和用途	40
二、吴氏网的使用方法和要点	40
三、吴氏网在结晶学上应用的实例	41
<b>第四章 晶体外形的宏观对称</b>	<b>43</b>
第一节 晶体的对称性	43
一、对称的概念	43
二、晶体对称的特点	43
第二节 晶体的宏观对称操作和对称要素	43
一、对称操作和对称要素的概念	43
二、晶体的宏观对称要素	44
第三节 对称要素的组合	48
第四节 晶体的三十二种对称型	51
一、对称型的概念	51
二、晶体对称型的推导	52
第五节 晶体的分类	54
一、晶体分类的依据	54
二、晶体分类	54
三、32种对称型的极射赤平投影	57
<b>第五章 晶体的理想形态</b>	<b>65</b>
第一节 晶体单形的概述	65
一、单形的概念	65
二、单形推导的举例	65
三、单形的命名和特殊类型	74
第二节 晶体的四十七种单形	74
一、低级晶族的单形	74

二、中级晶族的单形	76
三、高级晶族的单形	77
第三节 晶体的聚形	79
一、聚形的概念	79
二、聚形的分析	80
三、实际晶体的聚形举例	80
第六章 晶体定向和结晶符号	84
第一节 晶体定向和整数定律	84
一、晶体定向	84
二、晶体的整数定律	85
三、各晶系的晶体定向和晶体常数	86
第二节 结晶符号	90
一、晶面符号	90
二、单形符号	92
三、晶棱符号	92
四、晶带定律和晶带符号	93
第三节 晶体计算	96
一、三方和六方晶系的米勒尔符号和布拉维符号间的换算	96
二、晶体几何常数的计算	97
三、晶面符号的确定	98
第七章 晶体构造几何理论	101
第一节 概述	101
一、晶体构造中的等质点和等同点	101
二、晶体构造几何理论研究的内容和方法	102
第二节 晶体构造的十四种空间格子	102
一、晶体构造中单位平行六面体	102
二、晶体构造中空间格子类型	103
三、各晶系的空间格子	105
四、晶胞的概念	107
第三节 晶体构造的微观对称	109
一、晶体构造微观对称的特点	109
二、平移轴——平移格子	110
三、螺旋对称轴	110
四、滑移对称面	113
第四节 晶体构造的空间群	114
一、空间群的概念和特征	114
二、空间群的国际符号	115
三、空间群的推导举例	118
四、空间群的投影图示	120
第五节 晶体构造的等效点系	123
一、等效点系的概念	123
二、等效点系的重复点数	124

三、等效点系的实际意义 .....	125
第八章 实际晶体和晶体连生 .....	129
第一节 实际晶体构造中的缺陷 .....	129
一、晶体构造中的点缺陷 .....	129
二、晶体构造中的线缺陷——位错 .....	130
三、晶体构造中的面缺陷——镶嵌构造 .....	131
四、固溶体 .....	132
第二节 实际晶体外形上的缺陷 .....	133
一、实际晶体的特殊形态 .....	133
二、实际晶体的界面缺陷 .....	135
第三节 实际晶体的连生 .....	137
一、晶体的不规则连生 .....	137
二、晶体的规则连生 .....	137
第四节 双晶 .....	140
一、双晶要素和双晶律 .....	140
二、双晶类型 .....	142
三、研究双晶的实际意义 .....	144
附录 I 结晶学实习指导书 .....	146
实习一 晶体测量与投影 .....	146
实习二 晶体宏观对称要素的寻找 .....	149
实习三 单形认识与聚形分析 .....	151
实习四 晶体定向及晶面符号 .....	156
实习五 晶体构造空间群的确定 .....	158
附录 II 吴氏网 .....	161
主要参考文献 .....	162

# 绪 论

## 一、结晶学及其研究内容

结晶学是一门研究结晶体的自然科学。具体地说它是研究晶体的发生，成长、外部形态、内部构造、物理性质、化学性质、晶体的破坏，人工制备以及它们相互关系的科学。

以上所述，不难看出结晶学所研究的内容，涉及面很广。可以包括以下几个方面：

(1) 晶体生长学——研究晶体的发生、成长和破坏过程。探讨在这些过程中，各种因素的影响和作用，从而从理论上给以阐明。

(2) 晶体形态学——(又称几何结晶学)研究晶体外部形态的几何关系及其规律。如晶面、晶棱和顶角的分布规律等。

(3) 晶体构造学——研究晶体内部构造，各类几何点在空间分布的规律性。

(4) 晶体化学——探究原子、离子、分子或离子团在晶体内的分布规律。从而阐明化学成分与晶体结构以及晶体的物理性质，化学性质之间的关系。

(5) 晶体物理学——研究晶体的力学、光学、热学、电学、磁学等各种物理性能，及其与成分和构造间的关系。

本书内容以几何结晶学为主。同时，也讨论了晶体生长的基本理论和晶体内部的格子构造规律以及其它有关的内容。在讨论和叙述过程中，尽量结合无机材料科学的特点和实际需要。

## 二、结晶学发展简史

结晶学的发展和其它学科一样，都是随着人类社会生产力的发展而逐渐发展起来的。它的发展过程如同人们认识事物的过程一样，是由表及里，由简单到复杂的。

十七世纪以前，人们对晶体就已经开始有了一些认识。但是由于在这一时期生产发展很慢，欧洲各国宗教神权占了统治地位。因此，对于各种自然现象的解释也都带上了宗教迷信的色彩。对晶体的认识也不例外，把它看成是上帝创造的，是永恒不变的东西。

十七世纪以后，结晶学开始作为一门科学得到发展。人们开始从事这方面的研究，发现了许多与结晶体本质有关的现象。十八世纪为几何结晶学的主要发展时期，至十九世纪几何结晶学逐渐走向完备，达到了成熟阶段，开始进行晶体构造学方面的研究。到了十九世纪末X射线被人们发现，并于二十世纪初把它应用到晶体内部构造中去。这样，便使得结晶学的发展大大地向前推进一步。出现了结晶学的许多新分支，产生了许多新的理论。现将结晶学发展过程按其几个主要阶段分述如下：

### (1) 萌芽时期(十七世纪)

这个时期是结晶学开始发展阶段，一般只是注意晶体的外表研究。到了十七世纪末期才开始注意到晶体的光学性质。

1.1660年丹麦学者斯丹诺(N. Steno 1638—1687)对石英和赤铁矿晶体进行了研究后，首先发现了晶体的面角守恒定律(又称斯丹诺定律)。这一定律的发现便奠定了结晶



学的基础，特别是几何结晶学的基础。使人们从千姿百态的晶体外形中找到了初步规律。与此同时，丹麦学者巴尔托林（E. Bartolin 1625—1698）于1669年又在方解石的晶体中发现了双折射现象。从而奠定了晶体光学的基础。

2. 1678年荷兰学者惠更斯（C. Huygens 1629—1695）根据方解石的解理和双折射性质，提出了晶体是具有一定形状的物质质点（成椭球形的物质分子）作规则的累迭而成的，还试图找出晶体内部的构造规律。这一观点是晶体构造思想的最早萌芽。

## （2）发展阶段（十八——十九世纪）

这个时期是几何结晶学的主要发展阶段，几何结晶学的许多基本定律，都在这时建立起来。到了十九世纪，可以说是已经达到了非常成熟的阶段，并提出了晶体构造的理论。

1. 俄国学者艾列尔（Эйлер 1707—1783）研究晶体的形态特征，发现所有晶体的晶面数加角顶总是等于晶棱数加2这一公式，后来被人们称为艾列尔公式。

2. 1729年俄国学者罗蒙诺索夫（М. В. Ломоносов 1711—1765）创立了“微分子学说”，认为晶体是由球形的微分子堆砌而成的。他以此解释了硝石（ $\text{NaNO}_3$ ）晶体的六边形与柱面的夹角总是 $120^\circ$ 。这就不但从理论上阐释了晶体面角守恒定律的本质问题，而且这一见解和后来所建立起来的晶体构造的现代概念有些相近。

3. 1780年法国学者阿诺德（A. C. Arnould 1742—1806）发明接触测角仪。后来，法国学者罗美德利尔（Louis Romé De L'Isle 1736—1790）利用这一测角仪进行了二十多年的测角工作，一共测量了500多种矿物晶体。肯定了晶体面角守恒定律的普遍意义。

4. 1784年法国学者阿羽依（R. J. Haiiy 1743—1822）基于对方解石晶体沿着解理面裂开性质的观察，提出了晶体是由无数个具有多面体形状的原始“组成单位”在三度空间无间隙地平行堆砌而成。他的这种思想奠定了晶体构造学的基础。

5. 1801年阿羽依发表了著名的整数定律（又称阿羽依定律），从而满意地解释了晶体外形与其内部构造间的关系。此外，他又提出了晶体是对称的，这种对称不但为晶体外形所固有，同时也表现在晶体的物理性质上。

6. 1809年英国学者乌拉斯顿（W. H. Wollaston 1766—1828）设计出了第一台单圈反射测角仪。这种仪器的出现，使得晶体测角工作的精度大为提高。当时，这项工作盛极一时，曾积累了许多实际资料。

7. 1805—1809年间，德国学者魏斯（C. S. Weiss 1780—1856）以实验方法确定了晶体中不同的旋转轴。继之又总结出了晶体的对称定律，并于1813年首先提出晶体分为六大晶系。他的这些工作为晶体的合理分类奠定了基础。与此同时，他又确定了结晶学中另一个重要定律——晶带定律（又称魏斯定律）。从而进一步阐明了晶体界限要素之间的关系。

8. 1818年和1839年德国学者魏斯和英国学者米勒尔（W. H. Miller 1801—1880）先后创立了表示晶面空间位置的魏氏符号和米氏符号。后者至今仍得到广泛的应用。

9. 1830年德国学者赫塞尔（I. F. Ch. Hessel 1792—1872）首先推导出晶体外形可能的一切对称组合—32种对称型。但由于当时不被重视，所以他的这一成果未被人们所注意。

10. 1867年俄国学者加多林（А. В. Гадолин 1828—1892）用严谨的数学方法加以推

导，得出了相同的32种对称型，引起人们的重视。从而完成了晶体宏观对称的总结工作，为晶体的分类奠定了基础。

晶体内部构造理论的研究工作，随着几何结晶学的深入开展，也得到了迅速的发展。

11.1842年德国学者弗兰肯汉姆 (M.L.Frankenheim 1801—1869) 首先提出了晶体内部格子构造的理论。他认为晶体的内部构造应以点为单位在三度空间成周期性的重复排列。同时，又提出了平行六面体的概念。据此，又推出了15种可能的空间格子型式。

12.1848年法国学者布拉维 (A.Bravais 1811—1863) 修正了弗兰肯汉姆的研究成果，并于1855年用数学的方法推导出了晶体构造中14种空间格子。成为近代晶体构造理论的奠基人。

13.1879年德国学者松克 (L.Söhncke 1842—1897) 在布拉维构造理论的基础上又进一步将14种空间格子的等同点系发展成为包括平移、旋转和螺旋旋转群的65种规则点系 (松克点系)。

14.1889年俄国结晶学家、现代结晶学的奠基人费多罗夫 (Е.С.Фёдоров 1853—1919) 第一个提出反映滑移这一新的对称变换。从而运用数学的方法推导出了晶体结构中一切可能的对称要素组合方式——230种空间群 (费多罗夫群) 这一理论便成为一切有关晶体构造的研究基础。同时，费多罗夫又发明了双圈测角仪和费氏旋转台使晶体的研究工作大大向前推进一步。

15.1891年和1894年德国学者熊夫利斯 (A.M.Schönflies 1853—1928) 和英国学者巴罗 (W.Banlow 1848—1934) 分别于1891年和1894年从点在空间排列方式的角度出发，相继用不同的方法得出了同样的结果。

至此，晶体构造的理论研究工作已经非常成熟了，为晶体结构的分析建立了理论基础，并提供了可能。然而，这一理论得到进一步的证实要在二十年以后。

### (3) 近代 (二十世纪)

1.1912年，德国学者劳埃 (M.V.Laue 1879—1960) 第一次成功地进行了X射线通过晶体发生衍射的实验。这才具体证实了晶体格子构造的真实性。以后，在劳埃的指导下，弗瑞德里赫 (W.Friedrich) 和克尼屏 (P.Knippling) 利用X射线通过闪锌矿晶体时，同样成功地获得了清晰的衍射斑点，更进一步证实了劳埃的设想。

由于劳埃实验的成功，使结晶学进入了一个蓬勃发展的阶段。它不仅证实了晶体构造的理论。而且更重要的是提供了用X射线来研究晶体具体构造的可能，为晶体构造学的发展开辟了一个广阔的前景。

从此，便形成了一门新的学科——X射线晶体学。劳埃为此又确立了著名的晶体衍射劳埃方程式。

2.1913年英国学者布拉格 (W.H.Bragg 1862—1942) 和俄国学者吴里夫 (Ю.В.Вульф 1863—1925) 各自独立地导出了X射线晶体结构分析的基本公式，即著名的吴里夫——布拉格公式。历史上首先被人们所认识的NaCl和KCl的晶体构造，便是由W.L.布拉格所揭示的。

从此，X射线晶体结构的分析工作便得以广泛地开展。许多晶体的内部构造也都一一地被揭示出来。人们对晶体的研究便打开了新的思路，不限于化学组成，也涉及到晶形和物性的相互关系，并深入到晶体的内部构造中去。于是结晶学的又一个分支——晶体化学

经过长期的孕育便得到了产生和发展。近代结晶化学相继取得了许多重大的成就。

3.1951年苏联学者舒勃尼柯夫创立了正负对称性的概念（Л.В.Щуьников 1901—1945）。基于这一新的概念，另外二位苏联学者，札莫礼也夫和别洛夫（Н.В.Белов）又将230个空间群导衍而成为1651个舒勃尼柯夫群。

4.1959年，我国学者彭志忠等发现了一种新矿物（香花石），填补了32晶类中一个晶类（五角三四面体晶类）的空白。对葡萄石的研究也增加了一种新的构造单位。

结晶学到现在为止，可以说它已经发展成为一门以晶体为实际基础而具有高度的理论性和严密的逻辑性的科学了。

### 三、结晶学与无机材料学的关系

结晶学是无机非金属材料（简称无机材料——下同）类专业的一门基础课，它无论是与无机材料学的发展，还是与无机材料工业生产方面都有着极其密切的联系，具体说来可有以下几点：

（1）无机材料制品大多是由兼有离子键和共价键的结晶体所组成的。

无机材料的种类很多，通常是以固态状态而被使用，就固体状态的无机材料来说，它包括有结晶态和非晶态二种以及由它们所组合而成的复合态。

结晶态分单晶和多晶两类；单晶指的是单晶体，主要是天然的矿物晶体和人造的晶体材料，如：天然的水晶、长石、萤石和人造的云母、单晶硅、金刚石、红宝石和白宝石等；多晶则是由无数颗细小的单晶体聚合而成的。在晶粒和晶粒之间由界面相隔开，可以由适量的非晶物质填充而粘结起来，如各种传统陶瓷和耐火材料等；它可以只有少量的非晶态物质的存在，甚至全无，如锆钛酸铅瓷和高纯氧化铝瓷等。

非晶态的固体材料主要是指各种玻璃制品，尽管如此，可是在玻璃体中，也还会出现各种“玻璃结石”，这些玻璃结石又多是由晶体所组成。

复合态的固体材料指的是有机、无机、无机与有机的混合材料。如玻璃钢、金属陶瓷和纤维补强陶瓷等，就其材料的组成来说，也多是晶体。

（2）天然岩矿和化工原料绝大部分都是晶体，这些都是无机材料工业的重要原料。

无机材料工业用的原料有两种，一种是矿物原料，一种是化工原料，两种原料绝大部分都是晶体。如金刚石，刚玉、碳化硅和氮化硅等矿物，本身就是高硬度的晶体。它们都是制造研磨材料和切削材料的重要原料；冰洲石（方解石的一种），由于它具有高双折射率，又多被用来制作偏光棱镜；透明的水晶常被用来制作光谱仪中的分光棱镜，由于它具有压电性，又多用在无线电工业上作为控制频率用的音频射频频的振荡器和滤波器，也是制造雷达时不可缺少的原料。

在陶瓷工业上，石英、长石和粘土矿物等是传统陶瓷（日用瓷、卫生瓷、艺术瓷、电瓷等）的重要原料，所以这类陶瓷又称为“三成分陶瓷”。电子陶瓷主要应用的化工原料，如钛白粉（ $TiO_2$ ）、氧化铅（ $PbO$ ）等，它都是晶体。

水泥工业常用石灰岩、大理岩、泥灰岩、铝矾土、石英岩、萤石和石膏矿物等作原料。玻璃工业常用长石，石英、芒硝、纯碱、大理岩、石灰石和锆英石等作原料。耐火材料工业常用菱镁矿、铬铁矿，白云岩、粘土岩、铝土矿和结晶硅石作为原料。这些矿物和岩石都是由晶体组成的。再如冶金工业的炉渣、钢渣和矿渣等，其中很多也都是矿物晶体。

由此可见，无机材料和矿物晶体关系是十分密切的。应用这些矿物作为原料时，就需要有结晶学的知识。反之，进行结晶学的研究，又可以促使我们了解到晶体的更多性能。

(3) 应用结晶学的理论和知识可以指导生产；合理地使用晶体，制造晶体，为改进材料性能提供可能。

众所周知，材料的性能是由其组成和结构所决定的。而其中结构又被看成是整个生产工艺过程的核心问题。不同的化学组成，可以有不同结构和不同的性能；即使是同样的化学组成，由于其工艺条件不一，显微结构各异，制品性能也可以大不相同。由此可见，结构是评定材料优劣的关键因素，人们为了提高材料的性能，总是不断地改进配方、调整其结构因素，使其获得最佳的性能，以满足生产上的需要。

如在冶金部门常见到应用结晶化学的知识，通过对金属冶炼（合金化）和热处理控制晶粒；应用合金化和特殊的工艺方法等，以获得在特定显微结构下所具有的特异性能。在陶瓷工业，为了提高陶瓷材料的性能，也采用了类似于金属材料热加工的方法，在其制备过程中促使晶粒在瓷坯中，按其结晶学中特有的晶面或晶棱方向作有序的排列，形成织构，则使陶瓷材料不仅在性能上显示出晶体本征的各向异性，而且兼有单晶和多晶材料的优点，成为有特殊性能，特殊用途的新型功能材料——织构材料。生产高硬度材料时，在刚玉矿物相中通过加入 $\text{Cr}_2\text{O}_3$ 形成“合金化”固熔体，以进一步提高它的硬度。类似这些通过掺杂，使材料得以改性的例子是举不胜举。凡此种种为提高和改进材料性能的工作，都需要结晶学的知识和理论，否则，便无从下手。

从以上很不全面的点滴例子中，我们不难看出结晶学在无机材料生产实践中所起的重要作用了。结晶学作为一门基础科学，它从理论上指导并解决了生产实践中的许多重大问题，同时，它从实践中更加丰富了自己的理论。

# 第一章 晶体与非晶体

本章主要阐明晶体的基本概念；晶体内部构造所必须遵循的共同规律——空间格子规律，以及由此而产生的一切晶体所共有的性质——晶体的基本性质。此外，也阐述了非晶体的基本概念。

## 第一节 晶 体

### 一、对晶体的认识过程

人们认识晶体，是从天然矿物外部形态的观察开始的。天然矿物的种类很多，绝大部分都是晶体，常具有独特的几何多面体的外形。常见的晶体外表多为晶面（平整的面）所包围，同时还有晶棱（二个晶面相交的直线）和角顶（晶棱会聚的夹角）的存在，如图1-1所示。于是，人们便把这种具有天然生成（而非人工磨制）的规则几何多面体外形的固体，称之为晶体。这是人们最早对晶体的认识，显然这是不够全面的，是没有深入认识晶体内部构造的结果。晶体不是绝对的具有规则的几何多面体外形，它可以具有规则的几何多面体外形，也可以不具有。例如在盐湖中产出的石盐（NaCl），有立方形的晶体，也有不规则外形的颗粒，它们两者之间，除了形态上的差别以外，所有其它的物理和化学性质都完全一样。而且，通过实验证明，如果将所有不规则外形的石盐颗粒，放在NaCl过饱和的溶液中，让它有充分的时间继续生长时，结果都同样能长成立方体形的外形。

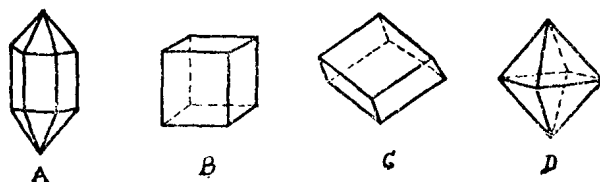


图 1-1 天然矿物晶体

A—石英 B—石盐 C—方解石 D—萤石

由此可见，多面体的几何外形并不是晶体的本质，而只是晶体内部某种本质因素所具有的规律性在晶体外表上的一种反映。有关晶体的本质问题，开始没有弄清，只是提出各种关于晶体内部构造的假说。直到本世纪初（1912年），应用了X射线对晶体内部构造进行了研究后，才搞清楚。原来，一切晶体的内部质点（原子、离子、离子团或分子）都是作完全有规则排列而形成了所谓“格子构造”。

图1-2示出石盐（NaCl）的晶体结构，其中图A表明石盐晶体的内部质点（Na<sup>+</sup>离子和Cl<sup>-</sup>离子）的实际分布情况，图B是在石盐晶体结构中割取下的一个能代表整个结构规律的最小单位（晶胞）。图中大球代表氯离子，小球代表钠离子。从图中可以看出，Na<sup>+</sup>离

子和 $\text{Cl}^-$ 离子在三维空间交错排列，它们在不同的方向上，都按着一定的间距而重复出现，在沿着立方体的三条晶棱的方向，每隔 $5.628\text{\AA}$ （ $1\text{\AA}=10^{-8}$ 厘米）的距离，氯离子或钠离子均重复出现一次；而沿着立方体对角线方向，则又每隔 $3.978\text{\AA}$ 重复出现一次。在其他的方向上，也有类似的情况，只不过两个离子重复出现的间距不同而已。如果改用点和圈分别代表 $\text{Na}^+$ 离子和 $\text{Cl}^-$ 离子的中心点，并用直线将它们连接起来，那末，就可以得到一个如同图C所示的食盐晶体的格子状构造的图形来。这种晶体的格子构造又称作结晶格子（简称晶格）。实验证明，不论外部形态是否有规则，所有食盐晶体内部构造中的质点，都是作同样的立方格子状排列。显然，食盐晶体之所以能够形成规则的几何外形，正是由于受到格子构造规律的控制所致。

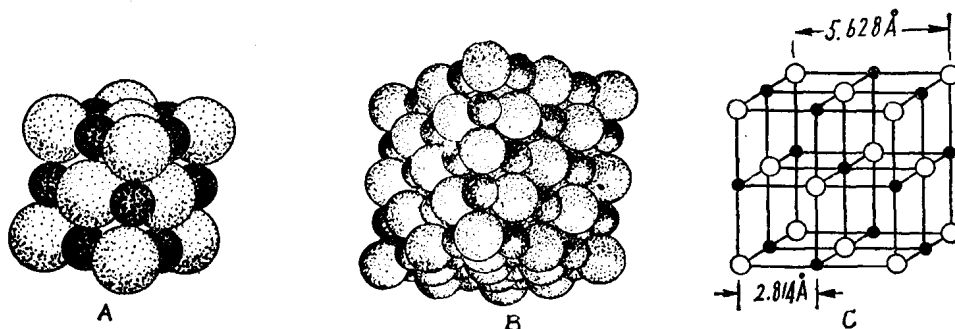


图 1-2 食盐 ( $\text{NaCl}$ ) 的晶体结构  
 $\bullet$ — $\text{Na}^+$ ;  $\circ$ — $\text{Cl}^-$

对于其它任何一种的晶体来说，情况都是一样的，不同的只是由于不同的晶体，它们的质点种类不同，排列的方式不一或是质点间距不同而已。例如氧化镁 $\text{MgO}$ 晶体，组成它的内部质点是 $\text{Mg}^{2+}$ 和 $\text{O}^{2-}$ ，排列的形式一样，都是呈立方格子状。可质点的间距不一，沿着立方体三条棱的方向重复的周期为 $4.203\text{\AA}$ ，如果把图1-2A中的大球看成是 $\text{O}^{2-}$ ，小球看成是 $\text{Mg}^{2+}$ ，那末图1-2C所示的 $\text{NaCl}$ 晶体结构便成为 $\text{MgO}$ 的晶体结构了。又如方解石 $\text{CaCO}_3$ 晶体，它的晶体结构相当于把 $\text{NaCl}$ 的晶体结构沿着立方体中的一条对角线方向压扁到棱交角为 $101^\circ 55'$ 的程度，并以 $\text{Ca}^{2+}$ 取代 $\text{Na}^+$ 的位置，以 $(\text{CO}_3)^{2-}$ 取代 $\text{Cl}^-$ 的位置而成（图1-3）。这时，沿着这样一个菱角体的棱方向，以 $\text{Ca}^{2+}$ 和 $(\text{CO}_3)^{2-}$ 交替重复排列，而重复周期为 $6.41\text{\AA}$ 。至于其它的晶体，如正长石 $\text{K}[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$ ，白云母 $\text{KAl}[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}][\text{OH}]_2$ 等等；它们所包含的质点种类更多，结构的排列形式也更为复杂。尽管这样，可对任何一个晶体来说，不论其晶体的结构多么复杂，其内部质点在三维空间总是周期性的重复排列。

## 二、晶体的准确含义

晶体不同于非晶体，其根本的区别就在于内部质点排列是否有规则，晶体内部质点排列总是有规则的，如若不具有这一特点，那它就不成为晶体。所以晶体的准确含义应当是：晶体是内部质点在三维空间周期性重复排列的固体。换句话说：晶体是具有格子构造的固体。

具有格子构造的固体物质称为结晶质，结晶质在空间的有限部分称为晶体。从这角度出发，通常我们习惯上也把不具几何多面体外形的晶体叫作晶粒、晶块或晶质体。

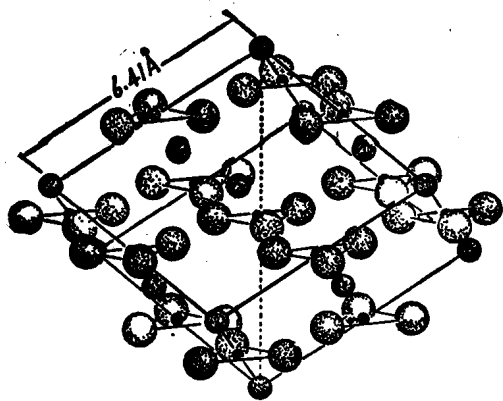


图 1-3 方解石 ( $\text{CaCO}_3$ ) 晶体结构

晶体。这些物质的内部质点都是作有规则的排列而构成了一个格子构造。因此，可以毫不夸口地说：“我们是生活在一个晶体的世界里”。

晶体不仅分布广、种类多，大小也相差很大，大的如苏联乌拉尔山产出的天河石，整座采石场就座落在一个天河石晶体上，小的一般肉眼都无法分辨，必须借助于显微镜，X光衍射分析甚至高分辨率的透射电镜才能判断。

## 第二节 晶体的内部构造

### 一、空间格子及其构成规律

一切晶体的内部质点，总是作有规则的排列。这种有规则排列的质点，它们的性质完全相同，在晶体结构中占据的位置一样，其周围的环境和方位都完全一致。如果从几何观点出发，把这些质点在空间上所处的位置表示出来，那末这种点便称之为相当点（或等同点）。

图1-4B所示的是食盐晶体结构（图1-4A）中任选一个几何点，这个点可以选在某一 $\text{Cl}^-$ 离子和 $\text{Na}^+$ 离子的接触上，也可以选在 $\text{Na}^+$ 或 $\text{Cl}^-$ 离子的中心，然后便以此为准，在整个结构中把所有这样的点都选出来。这样的每一个点，都应该在晶体结构中占据相同位置（即 $\text{Cl}^-$ 离子和 $\text{Na}^+$ 离子的接触点）而且具有相同环境（下边必定为一 $\text{Cl}^-$ 离子，而上边必定为一 $\text{Na}^+$ 离子）。显然，这一系列的等同点，在三维空间也是成周期性重复排列的。因此，不难理解，同一种晶体结构，所选取的等同点在空间的相对分布，肯定是一致的，而不同晶体的内部结构必然是有所区别。

如果结晶格子中的等同点，不考虑它所代表的质点种类和大小，只是作为一般几何点来看待，那末，这样的结晶格子就成了空间格子。显然它是从实际晶体内部构造中抽象出来的，是反映实际晶体内部构造中质点在三维空间周期性重复排列规律的几何图形。

空间格子的一般形式如图1-5所示。它是由结点、行列、面网和平行六面体所构成。

（1）结点——空间格子的等同点；在实际晶体中，在结点的位置上可以是同种的质点。但就结点的本身来说，它并不代表任何质点，它只有几何上意义，纯属几何点。

（2）行列——结点在一个方位上沿直线排列即构成行列，如图1-6所示。空间格子

中任意两结点联结起来就是一条行列的方向，行列中相邻结点间的距离称为结点间距（图1-6中的 $a$ ）。由于结点在行列上是重复的，因此，同一行列的结点间距是相等的，在平行的行列上结点间距也是相等的；不同方向行列的结点间距一般是不等的。

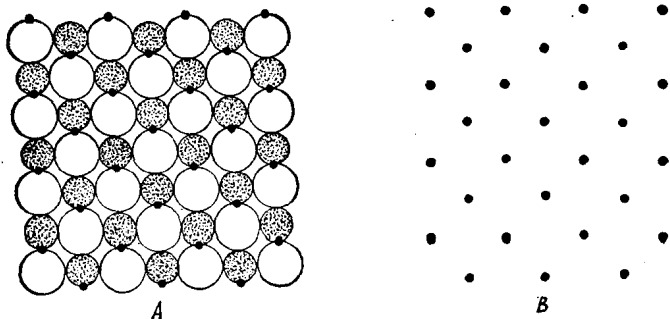


图 1-4 食盐 (NaCl) 晶体结构中等同点的分布

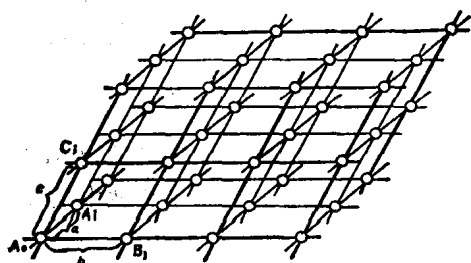


图 1-5 空间格子

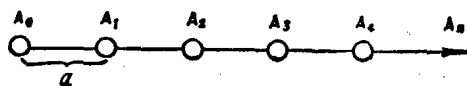


图 1-6 行列

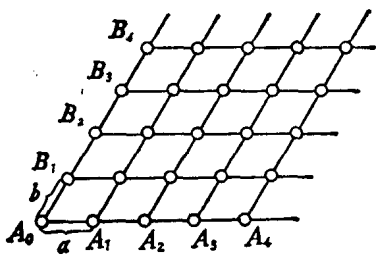


图 1-7 面网

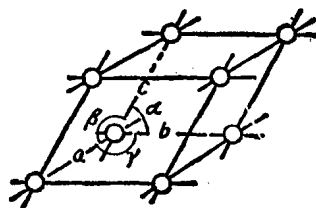


图 1-8 平行六面体

(3) 面网——不在同一行列上的任意三个结点就可以联结成一个面网，也即任意二个相交的行列便可以决定一个面网。面网上单位面积内结点的数目称为面网密度，任意两个相邻面网间的垂直距离称为面网间距。相互平行的面网，其面网密度和面网间距必定相等；不相平行的面网，其面网密度及面网间距一般都不相等。而且面网密度大的，其面网间距也大，反之，面网密度小的，其面网间距也小。

(4) 平行六面体——如图1-8所示为空间格子的最小体积单位，是由三对平行而相等的平行四边形所构成。空间格子就是由无数个平行六面体毫无间隙地重复堆迭而成。空间格子是从实际晶体中抽象出来的几何图形，分简单和复杂的两种，简单的空间格子，结点（等同点）只分布在平行六面体的角顶；复杂的空间格子，在平行六面体的体中心或面



中心都有结点（等同点）的存在。

## 二、空间格子和格子构造

以上所谈的空间格子规律是一切晶体所共同遵循的基本规律。但应该指出，空间格子是抽象的，它是表示晶体质点中等同点在三维空间无限重复的几何图形，而实际晶体是有限的，它的几何外形是宏观的有限图形，是晶体内部格子构造的一种反映。空间格子的最小单位，称平行六面体，它代表空间格子构造，等同点在空间排列的规律性。

这里还应该特别指出，晶体的空间格子只是表示晶体的内部构造中质点排布的几何规律，而不讨论晶体构造的实质，晶体内部构造的实质问题将在“无机材料物理化学”中的“结晶”和“结晶体结构缺陷”部分进行讨论。因此，这里所谈的晶体的空间格子只有几何上意义，而没有具体的物理和化学的含义。

## 第三节 晶体的基本性质

晶体是具有格子构造的固体，也就是说，格子构造是一切晶体所必备的条件。凡是由于晶体格子构造所决定的，并为所有一切晶体所共有的性质，称之为晶体的基本性质。

晶体的基本性质是晶体的共性，是指晶体所共有的性质，归纳起来共有五种：即自限性、均一性、异向性、对称性和稳定性。

### 一、晶体的自限性

是指所有的晶体均具有自发地形成封闭的几何多面体外形能力的性质，如图1-9所示。

显然，这是由于晶体格子构造规律所控制的。晶面就是晶体格子构造中最外层的面网所在，晶棱是最外层面网相交的公共行列，而角顶则是结点的所在。由于一切晶体都具有格子构造，所以，必然能自发地形成几何多面体的外形，把它们自身封闭起来。晶面，晶棱和角顶与格子构造中的面网、行列及结点是相对应的，它们之间的关系见图1-10。但应该指出，自然生长和人造矿物晶体中呈现规则的几何多面体外形的不多。主要是由于它们在生长时受到空间的限制。不过，如若条件许可，让它们继续生长时，它们还是可以自发地形成规则的几何多面体外形的。

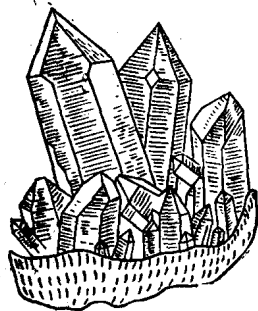


图 1-9 具有几何多面体外形的石英晶体

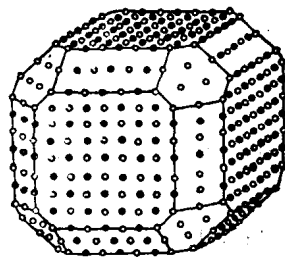


图 1-10 晶面、晶棱、角顶与面网、行列、结点的关系示意图

### 二、晶体的均一性

是指同一晶体在其任何一个部位上都具有相同性质的特性。图1-11为一石英晶体，在其不同部位，我们任取两小块分别为1和2，并在这两小块石英晶体的相同方向上如  $aa$  或