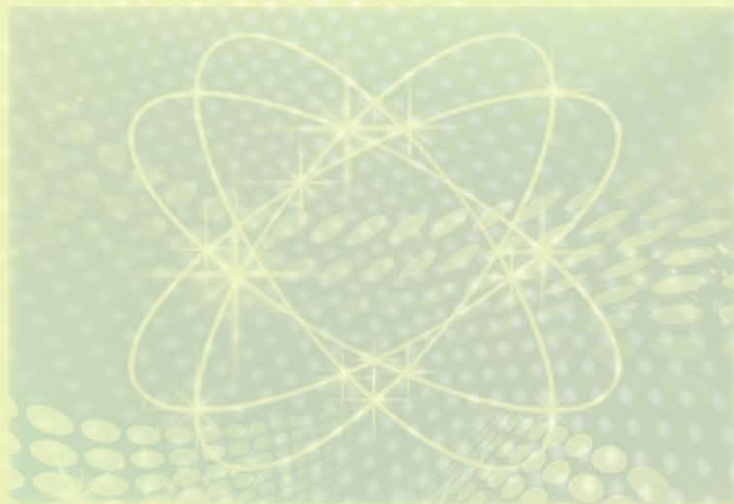


结晶矿物学



前 言

20 世纪 80 年代以来,我国高等地质院校及其他院校的石油地质(现改为资源勘探工程)、水文地质、工程地质(现改为工程勘探)等有关专业的《结晶学与矿物学》课程均选用由王永华教授主编的《矿物学》教材。该教材 1984 年由地质出版社出版,曾得到有关教学单位和使用者的好评,先后重印了多次,在教学中发挥了重要的作用。

近年来,随着大学培养目标的改进,以淡化专业,加强基础成为未来教学目标,则要求教学改革和教材建设必须随之发展。编者在《结晶学与矿物学》教学实践中进行了多项改革,已取得明显效果,为重编《矿物学》教材奠定了良好的基础。

本教材作为王永华教授主编的《矿物学》的重编版,除继承原教材中重视结晶学、矿物学三基(基本理论、基本知识、基本技能)要求的思想外,还体现了对当前教学目标的要求,即尽可能反映现代结晶学、矿物学发展趋势,使教材既适合不同专业课堂教学要求,又能为这些专业的应用研究提供参考。因此本教材具有以下主要特色:

(1) 考虑到有些专业,如矿物材料等应用专业的需要,本教材加强晶体合成部分的内容,介绍了目前人工合成晶体的原理和主要方法,各种方法在合成晶体中的优、缺点等。

(2) 考虑到应用专业的学生在学习矿物学时,对晶体结构的理解与掌握比较困难,本教材加强了对矿物晶体结构的介绍,并结合讨论其对矿物形态、物理性质的制约。还将计算机制作的大多数晶体结构图,以原子坐标给出。其中比较复杂的晶体结构以三视图(即左视、前视、俯视)的形式展现出,便于学生理解与掌握矿物的主要晶体化学特征。

(3) 考虑到目前各学校的教学要求高,学时又比较少的矛盾,本教材在矿物各论介绍中,突出了各大类矿物的化学组成、晶体化学、形态与物理性质及成因产状特征概括介绍,使学生容易学习与理解这大类矿物总的特征。对单个矿物种类的资料也较多给出,使教材具备教科书和资料书的综合特点,供各学校教学和学生在学习时根据需要取舍。

(4) 考虑到目前许多教材中,单个矿物的形态与物理性质等分别描述,占教材篇幅较多,不利用学生学习,本教材将各族矿物的形态与物理性质以排比形式列表给出,既减少描述上的重复,又利于学生系统学习与掌握每个矿物族的矿物特征。

(5) 本教材加强了矿物成因产状与共生组合的介绍,将单个矿物与其他矿物形成环境条件结合起来,使学生在在学习单个矿物的同时也理解掌握共生矿物的规律。

(6) 本教材突出矿物用途介绍分量,将每种矿物的主要用途、意义详细给出,使学生在在学习矿物学知识的同时,了解与掌握主要矿物的用途及评价,利于学生应用矿物学知识解决实

际问题。

(7) 在矿物学的学习中,鉴定矿物(特别是肉眼鉴定矿物)是重要的学习任务,也是《矿物学》教学中的一个难点。为了提高学生肉眼鉴定矿物的能力,除了对各族矿物鉴定特征对比给出外,本教材在国内首次提供了常见矿物的典型彩色照片,供学生认识掌握肉眼鉴别矿物的特征。

(8) 为了增强学生学习的效果,本教材在每一章后留有习题与参考题,帮助学生复习与理解课程内容与要求。

(9) 考虑到不同学校不同专业的教学要求,将晶体投影与晶体微观对称有关内容放在附录一或二中,供有关教学单位根据需要而取舍。

为了充分尊重前人的劳动成果,本教材的图、表尽量注明资料出处。凡未作注明的图、表是编者们的成果或是已经公认的基础知识。

本教材的编写工作进行了多年,在编写的过程中得到来自各方面的关怀与支持,特别是西北大学地质学系矿物教研室的前辈们。在这里,特别怀念编者的导师、原《矿物学》教材主编王永华教授,在编者读研究生期间及参加工作后对编者教诲与培养,他的为人师表使编者终身难忘。另外,编者的同事刘良教授、陈丹玲副教授与编者进行过教材的讨论,研究并审阅教材初稿及提出宝贵意见。西北大学地质学系已故的李立宏高级工程师,学生李宇星、康磊完成晶体结构的计算机坐标图。张成立教授、赖绍聪教授、华洪教授等对编者进行鼓励与支持。另外,西北大学地质学系提供了出版费用。特此表示衷心感谢。由于编者的水平有限,难免有不足之处,敬请指正。

编者

2009年10月1日

目 录

绪 论	(1)
一、矿物和矿物学概念	(1)
二、矿物学发展简史与现状	(2)
三、矿物学未来发展必定融合于人类的可持续性科学发展	(3)
四、习题与思考题	(4)
第一章 晶体基本知识	(5)
一、晶体、非晶体与准晶体概念	(5)
二、晶体空间格子构造规律	(6)
三、晶体的基本性质	(10)
四、习题与思考题	(12)
第二章 晶体生长规律	(13)
一、晶体的生长过程	(13)
二、晶核的形成	(14)
三、晶体的生长理论	(14)
四、影响晶体生长与最终形态的外部因素	(17)
五、人工合成晶体	(19)
六、习题与思考题	(22)
第三章 晶体的对称	(23)
一、对称的概念	(23)
二、晶体对称的特点	(23)
三、晶体宏观对称操作与对称要素	(24)
四、对称要素组合定理	(29)
五、对称型	(29)
六、晶体对称分类体系	(30)
七、晶体的其他分类体系	(32)
八、习题与思考题	(33)
第四章 晶体定向与结晶符号	(34)

一、晶体定向	(34)
二、结晶学符号	(37)
三、习题与思考题	(42)
第五章 晶体理想形态	(43)
一、单形	(43)
二、聚形	(58)
三、习题与思考题	(61)
附一 晶体投影与 32 对称型及主要几何单形的投影*	(63)
一、晶体投影概念	(63)
二、极射赤平投影的原理与步骤	(63)
三、吴氏网	(64)
四、32 个对称型的极射赤平投影	(65)
五、主要几何单形的投影	(66)
六、晶体晶面投影举例	(75)
附二 晶体微观对称特征与实际晶体*	(76)
一、空间格子中点的坐标、行列与面网的符号	(76)
二、晶体微观对称要素	(77)
三、等效点系	(86)
四、实际晶体	(87)
第六章 矿物晶体化学基础知识	(91)
一、化学元素类型	(91)
二、原子半径与离子半径	(92)
三、球体紧密堆积原理	(97)
四、配位数与配位多面体	(100)
五、矿物键型与晶格类型	(102)
六、晶体结构类型与典型结构	(105)
七、类质同象	(107)
八、同质多象	(110)
九、多型	(112)
十、晶体结构中离子的有序、无序	(113)
十一、习题与思考题	(115)
第七章 矿物化学成分与化学性质	(116)
一、地壳的化学元素组成	(116)

二、矿物化学成分类型	(117)
三、胶体矿物	(118)
四、矿物中的“水”	(119)
五、矿物化学式	(121)
六、矿物化学性质	(123)
七、习题与思考题	(125)
第八章 矿物形态	(126)
一、矿物的单体特征	(126)
二、矿物连生体形态	(129)
三、矿物集合体形态	(135)
四、习题与思考题	(137)
第九章 矿物的物理性质	(138)
一、矿物的光学性质	(138)
二、矿物的力学性质	(142)
三、矿物的磁学性质	(148)
四、矿物的电学性质	(149)
五、矿物的放射性	(149)
六、习题与思考题	(150)
第十章 矿物形成与变化	(151)
一、形成矿物的地质作用	(151)
二、矿物形成条件与形成标志	(156)
三、矿物的变化	(159)
四、习题与思考题	(161)
第十一章 矿物鉴定分析与研究方法简介	(162)
一、矿物肉眼鉴定分析	(162)
二、仪器鉴定分析	(162)
三、习题与思考题	(168)
第十二章 矿物的分类与命名	(169)
一、矿物分类的基础	(169)
二、矿物晶体化学分类体系	(170)
三、矿物的命名	(171)
四、矿物内容介绍	(172)
五、习题与思考题	(173)

第十三章 自然元素矿物大类	(174)
一、概述	(174)
二、自然金属元素矿物类	(175)
三、自然非金属元素矿物类	(178)
四、习题与思考题	(182)
第十四章 硫化物及类似化合物矿物大类	(183)
一、概述	(183)
二、简单硫化物矿物类	(185)
三、对硫硫化物矿物类	(197)
四、硫酸盐矿物类	(200)
五、习题与思考题	(202)
第十五章 氧化物与氢氧化物矿物大类	(203)
一、概述	(203)
二、简单氧化物矿物类	(205)
三、复杂氧化物矿物类	(218)
四、氢氧化物矿物类	(227)
五、习题与思考题	(232)
第十六章 卤化物矿物大类	(233)
一、概述	(233)
二、氟化物矿物类	(234)
三、氯化物矿物类	(237)
四、习题与思考题	(239)
第十七章 含氧盐矿物大类(一)	(240)
第一类 碳酸盐矿物类	(241)
一、概述	(241)
二、方解石族矿物	(243)
三、文石族矿物	(248)
四、孔雀石族及其他族矿物	(250)
五、习题与思考题	(253)
第二类 硫酸盐矿物类	(255)
一、概述	(255)
二、无水硫酸盐矿物	(257)
三、含水硫酸盐矿物	(260)

四、习题与思考题	(264)
第三类 磷酸盐矿物	(265)
一、概述	(265)
二、无水磷酸盐矿物	(266)
三、含水磷酸盐矿物	(269)
四、习题与思考题	(272)
第四类 硼酸盐矿物	(273)
一、概述	(273)
二、无水硼酸盐矿物	(275)
三、含水硼酸盐矿物	(277)
四、习题与思考题	(279)
第五类 钒酸盐、砷酸盐、硝酸盐矿物	(280)
一、钒酸盐矿物	(280)
二、砷酸盐矿物	(282)
三、硝酸盐矿物	(286)
四、习题与思考题	(288)
第六类 钼酸盐、钨酸盐、铬酸盐矿物	(289)
一、钼酸盐矿物	(289)
二、钨酸盐矿物	(292)
三、铬酸盐矿物	(295)
四、习题与思考题	(297)
第十八章 含氧盐矿物大类(二) 硅酸盐矿物	(298)
概述	(298)
第一亚类 岛状结构硅酸盐矿物	(310)
一、综述	(310)
二、锆石、橄榄石、蓝晶石、红柱石分述	(310)
三、石榴石族矿物分述	(315)
四、黄玉、硬绿泥石、榍石、符山石分述	(318)
五、十字石、绿帘石、褐帘石、异极矿分述	(321)
六、习题与思考题	(323)
第二亚类 环状结构硅酸盐矿物	(324)
一、综述	(324)
二、绿柱石、电气石、堇青石分述	(324)

三、习题与思考题	(327)
第三亚类 链状结构硅酸盐矿物	(328)
一、综述	(328)
二、辉石族矿物	(328)
三、角闪石族矿物	(337)
四、习题与思考题	(346)
第四亚类 层状结构硅酸盐矿物	(348)
一、综述	(348)
二、主要矿物特征	(350)
三、粘土矿物	(358)
四、习题与思考题	(366)
第五亚类 架状结构硅酸盐矿物	(367)
一、综述	(367)
二、长石族矿物	(368)
三、似长石族矿物	(375)
四、沸石族矿物	(379)
五、习题与思考题	(384)
第十九章 有机矿物大类	(385)
一、概述	(385)
二、有机酸盐矿物类	(386)
三、碳氢化合物和氧化的碳氢化合物类矿物	(388)
四、碳有机非晶质矿物类	(389)
五、习题与思考题	(391)
主要参考文献	(392)

绪 论

一、矿物和矿物学概念

(一) 矿物的概念

矿物是自然界最常见的一种物质,它与人们的生活、生产实践密不可分。早在古代,我国先民就从采矿的实践活动中认识了“矿”,但未形成与建立起矿物的科学概念。随着人类社会生产活动和科学技术的发展、进步,人们对矿物不断认识,并逐步建立了矿物的科学概念。

矿物是自然界各种作用形成的天然的单质和化合物,它的形成作用包括地质作用、天体作用、生物作用等方面。矿物具有一定的化学组成和比较稳定的内部结构,并在一定物理化学条件下相对稳定,它构成了不同生成对象的组成单位。

在自然界,由地质作用形成的矿物,一般称其为矿物,它是组成地球的岩石和矿石的基本单位;由天体作用形成的矿物,一般被称为月岩矿物或宇宙矿物或陨石矿物,为构成月球、天体、陨石的基本单位;由自然界生物作用形成的矿物,一般被称为生态矿物,为构成生物体骨骼的重要组成部分;而在实验室或工厂通过人工合成或制造出的与自然形成的矿物具有相同或相似的化学组成、结构及物理化学性质的物质,被称为人造或合成矿物。

由自然作用形成的矿物多数情况下既有无机物,也有有机物,常呈固态,且大多数为晶体,在适宜条件下可自发长成规则的几何多面体形态;也有呈液态和气态。但也有学者认为呈气态和液态的物质不包括在矿物概念之内。

自然界形成的任意一种矿物都不是一成不变的,当其所处的环境条件发生改变时,原矿物则会发生改变,并变成在新环境条件下另一种稳定的矿物。因此,矿物是在各种作用变化的过程中化学元素运动和稳定的一种形式而已。

(二) 矿物学的概念

矿物学是研究矿物的一门科学。它也可作为地质学中的一个分支学科,是构成研究地质物质成分的学科之一。它研究的对象为矿物,即研究矿物的化学组成、矿物的晶体结构、矿物的形态与物理化学性质、矿物的成因与产状、矿物共生组合及矿物的用途等,还要研究矿物在时间和空间上的分布规律及其形成和变化的历史。因此,矿物学的研究内容和研究结果为地质学、天体学、生物学、材料学等学科在理论和应用上提供重要和必要的基础和依据。显然,矿物学是一门重要的基础学科和应用学科。

(三) 矿物学与其他学科的关系

矿物学与一系列理论学科、技术学科和应用科学有着密不可分的关系。

首先,由于矿物大多数是晶体,构成结晶学研究的内容。这也是矿物学的主要研究内容,因此,结晶学是矿物学的基础,二者关系密不可分。

地球化学与矿物学均可研究地球物质组成的基础学科,由于矿物是组成地质体的物质“分子”,是自然界化学元素不断运动迁移的“载体”。而地球化学则以研究地球中化学元素在时间、空间上的分布,迁移和富集的规律性为主要内容,所以与矿物学无法分割。

另外,在地球上,矿物是组成岩石、矿石的基本“分子”,是地壳、地幔等物质演化过程中元素存在的形式和运动的最重要的方式,它直接保存和记录了岩石、矿石形成条件、演化过程和历史的丰富信息。因此矿物学研究构成了岩石、矿石的研究基础。

此外,矿物学与地质科学中的其他基础学科,如构造地质学、地层学、地史学、古生物学、地球物理学、地震学等的关系密不可分,它为这些学科的研究提供物质基础和演化历史证据,如用标型矿物和矿物的标型特征建立成因模型等。

在地质应用科学中,矿物学为找矿矿物学、石油地质学、工程地质学、水文地质学、宝石学、土壤学、陶瓷学、选矿学、冶金学等学科的研究、发展提供了理论和方法支持。

矿物学的研究成果对材料科学,特别是对人工合成晶体材料的实验不仅提供了知识基础、理论准备、实验依据,同时也为新材料的研究、开发、合成与应用指明了方向。

从矿物学的发展看来,数学、物理学、化学、计算机技术、仪器分析等自然科学技术与矿物学是相互依存、相互促进、相互发展的,矿物学一方面需要这些科学知识作为发展、提高的理论基础,而这些学科的发展、提高依赖于矿物学提供的大量的实验物质、数据。因此它们的关系是密切联系、共同促进、共同发展的。

二、矿物学发展简史与现状

(一) 矿物学发展简史

矿物学是一门古老的自然科学,发展历史特别悠久。我国春秋战国时期的《山海经》是世界上最早研究矿物的著作。早期的矿物学研究主要集中在对矿物的记载,矿物表面特征,物理性质的肉眼描述和一部分的应用等方面,这为矿物学以后的发展奠定了基础。19世纪中期以来,随着科学技术的发展,矿物学研究经历了几次大的发展进程。

(1) 1857年前后,偏、反光显微镜研制成功并引入到矿物学研究中,对矿物学的发展起了很大的推动作用,使矿物学的研究由表面的描述进入到内部及光学特征的研究阶段。

(2) 20世纪初期,X射线分析成功应用于矿物内部晶体结构的分析研究中,在证明晶体结构几何理论的同时,为研究矿物的化学组成与晶体结构之间的关系奠定了科学基础,从而导致矿物学的研究内容进入第二次大突破。由此建立的结晶化学成为对矿物的系统研究和建立矿物晶体化学分类的重要基础。

(3) 20世纪30~40年代,对形成矿物的物理化学环境条件的研究,在揭示矿物的成因、晶体生长过程和生长机制、矿物的共生组合关系等方面进入到矿物科学最本质的研究阶段,

在研究深度和广度上都超越了以往的研究内容,为矿物学研究走向现代发展阶段作了开路先锋。

(4) 20 世纪 70 年代以来,矿物学的研究在现代核子科学、宇航科学、合成实验技术和电子计算机技术、电子显微镜、微区分析技术以及固体物理学、量子物理学、量子化学等先进科学引领下,进入微观领域,人们不仅可以研究矿物的原子、离子在晶体结构中的排列方式,也可以进行元素的赋存状态,元素的价态、键性,元素的同位素组成,矿物的色心等方面研究,使矿物学研究进入到现代化阶段。此外,也使矿物在不同领域的应用研究得到加强和发展。

(二) 矿物学发展现状

目前,矿物学发展已进入到理论研究更深入、应用研究更广泛的发展阶段。由于运用了晶体场理论、配位场理论、分子轨道理论、能带理论、量子力学、量子化学、固体物理学等理论,人们在阐明过渡元素的硫化物、氧化物、硅酸盐等矿物的问题上取得了有益的结果,用固体物理学理论研究矿物晶体中原子、原子核及电子结构和精细结构均取得显著进展。矿物学的理论研究中兼容了大量的其他学科的新思想和新理论。

在矿物学研究方法中,由于引入许多现代化分析测试技术,使矿物学研究内容和对象发生了很大变化。人们运用核磁共振谱、电子顺磁共振谱、红外吸收光谱、激光拉曼光谱、穆斯鲍尔谱等仪器的测试分析结果,在阐明矿物的微细结构、矿物的形成条件、矿物的包裹体特征、矿物的标型特征等方面发挥了极大的作用;运用高分辨率透射电子显微镜、扫描电镜研究矿物晶胞大小、晶体精细结构、矿物微形貌等内容,对矿物的某些基本知识进行了充实和发展;运用电子探针、离子探针、质子探针等仪器对微量矿物、微粒成分、成分环带、微小包体、同位素组成进行研究,使矿物学的研究与应用领域更加开阔、更加广泛。

现代人们更加关注自身生活质量和生活环境条件,使矿物学的研究和应用方向更加广泛,研究的内容和应用范围更加广阔,促使矿物学形成了许多分支学科,其中除了少数是继承传统矿物学的研究内容,如矿物化学、矿物形态学、矿物晶体结构、矿物物理化学、矿床矿物学等学科,大部分为新兴的分支学科,如成因矿物学、矿物物理学、量子矿物学、包裹体矿物学、宝玉石矿物学、环境矿物学、表面矿物学、纳米矿物学、材料矿物学、实验矿物学、生命矿物学等,这些学科都呈现出蓬勃发展的前景。

目前,科学的发展促使现代矿物学形成了四大板块,即矿物史学、描述矿物学、理论矿物学、应用矿物学,其中成因矿物学、矿物物理学、矿物晶体化学是其主要理论支柱。

三、矿物学未来发展必定融合于人类的可持续性科学发展

今天,矿物学的研究已不仅仅局限于研究地球表层的天然形成的化合物,而将研究方向向更加宽广的时空领域中所形成的物质方面拓展,也将人类自身组成、变化、活动产物、工业产物等也归纳于矿物学的研究中。而人类的可持续科学发展的要求将引领、促使着矿物学的研究发展方向。

(1) 人类进一步的发展会造成对矿物资源(包括无机、有机资源)的需求不断地扩大,这些必将促使人类开辟新的资源渠道以满足社会发展的需要。目前除了继续加强对地球陆地矿物资源的深入研究来寻找新的矿物资源和对已有资源进行二次回收和综合利用外,必须

寻找开辟包括海洋在内的矿物资源的第二战场,这将促使海洋矿物学及有关矿物学的形成与发展。

(2) 随着人类对自身的关注与研究,人类追求高质量、高度安全的生活,这些必将促使生命矿物学、环境矿物学、材料矿物学的发展和成熟。而这些矿物学研究方向在国外起步比较早,我国目前处于起步阶段。这些研究内容涉及面十分广泛,既有作物生长、生物食品、医药的安全问题,又有环境条件的安全与被污染问题,这必将推进生物矿物学发展与进步。如我国四川 2008 年发生的“5·12”大地震所造成的损失,对我国的环境安全、建筑材料性能、工程地基安全系数等方面的启示都对有关矿物学的研究提出了新的课题。

(3) 随着人类社会的发展,对新型材料的需求必将迅速增加,而对材料的成本要求要更低、要环保无污染,这必将促使材料矿物学的发展。而矿物材料不仅成本低,矿物材料的开发与利用可为研究、合成新型的人们所需的功能材料提供技术保证。人类的发展决定了新功能材料研究会处于激烈竞争的地位,将来哪个国家、地区掌握新材料的技术,必将处于科学技术的领先地位,必将处在科学技术强国的地位。今后新型矿物材料主要会集中在纳米材料、微孔材料、金刚石材料、环境治理材料等方面。

(4) 随着科学的发展,人类利用与开发的资源会越来越多,但同时产生的各种垃圾也会越来越多,这必将促使垃圾矿物学、环境矿物学的诞生和发展。人们在各种生产、生活活动中会产生垃圾,对这些垃圾必须建立在垃圾矿物学的角度上分析研究,哪些垃圾可直接作为矿物资源重新回收利用,哪些垃圾可分解利用,怎样的分解过程对环境不造成污染和伤害等等,都是垃圾矿物学将来要研究的内容。

(5) 人类对进一步探索地球的组成、发展演化的历史与规律的要求将促使成因矿物学、地幔矿物学、实验矿物学向更高发展。虽然人们利用地球物理学的研究成果对地球的结构有了认识,但其认识带有明显的不确定性。目前除了通过深部钻探来了解地球的矿物组成外,加强高温高压实验矿物学的研究将是人们提高认识地球物质组成、演化的一个主要途径。

(6) 目前,航天技术的发展、进步促使人类对太空、宇宙的认识与研究,要求宇宙矿物学要发展,利用人们过去对陨石、月岩的研究作为宇宙矿物学的起点,今后随着其他星球的登陆计划的实施,必将推动宇宙矿物学向广度和深度发展,为人类认识宇宙作出应有的贡献。

总之,随着人类的可持续性科学发展,需要以科学知识为指导,而矿物学知识也是重要的一个方面,也是科学发展中不能缺少的。所以必须学好矿物学知识,为人类、为祖国的发展作出贡献。

四、习题与思考题

- ①何谓矿物? 矿物学研究包括哪些范围?
- ②矿物学的发展与人类社会有什么关系?

第一章

晶体基本知识

自然界形成的矿物中绝大部分都是晶体,只有少部分是非晶体。晶体的固有特征也构成许多矿物的特性。因而晶体的基本知识与特征则构成矿物学的认识与研究的基础。学习矿物学必须具备晶体知识。

一、晶体、非晶体与准晶体概念

(一) 晶体的概念

对于晶体,在人们的日常生活中非常常见,如石盐(NaCl)、水晶(SiO_2)这些固体。这些晶体具有非常漂亮的几何形态。但人们有时也发现,石盐(NaCl)不一定都具有规则的几何形状,有的石盐呈任意形状或球形。这则反映出具有规则几何形态不是石盐晶体的唯一条件,而且石盐形态随外界环境条件而改变。这种现象促使人们应从本质上认识晶体。

晶体本质的认识经历了相当长的历史时期,直到20世纪20年代人们利用X射线对晶体进行分析研究,揭示出许多晶体的内部结构后得出:一切晶体,不论其形状怎样变化,其组成质点(原子、离子、离子团或分子)在空间都是按规律排列的。这种排列表现为质点在三维空间做周期性的平移重复而构成格子构造,见图1-2(a)。即晶体是内部质点在三维空间呈周期性重复排列的固体,或晶体是具有格子状结构的固体。如图1-1,石盐晶体结构中可明显看出这种规律性。

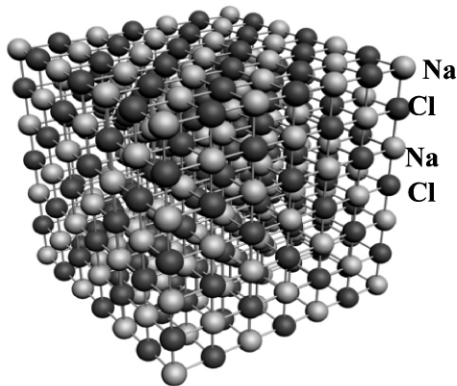


图1-1 石盐的晶体结构

在石盐成立方格子状的晶体结构中, Cl^- 与 Na^+ 在空间的许多方向上,都是各自按照一定的间距重复排列的,如沿立方体的棱方向上, Cl^- 与 Na^+ 各自都是以每相隔 0.5628nm 的距离重复排列;在沿立方体对角线方向上, Cl^- 与 Na^+ 各自都是以每相隔 0.3978nm 的距离重复排列;其他方向上 Cl^- 与 Na^+ 各自都是以每相隔不等的距离重复排列。如果将 Cl^- 与 Na^+ 的位置用直线连接起来,则得到一种格子状的图形。现已证明,所有石盐,不论其外部形态是否规则,其内部质点都是按照立方格子排列的。石盐之所以具有立方体外形是受到内部立方格子构造规律的制约。

(二) 非晶体的概念

在自然界,依然存在着许多看起来形状比较漂亮的固体,如玻璃制品。还有如琥珀、松

香等亮晶晶的东西。这些外形看起来比较规范的固体,经过研究发现,它们的内部质点均不作规则排列,无法在三维空间作周期性平移重复,不具有格子状的构造规律,所以被称为非晶质或非晶体,见图 1-2(b)。非晶体的规则几何形态是人为的,与其内部结构特征无关。在自然界自由状态下,非晶体是没有漂亮规则形态的。

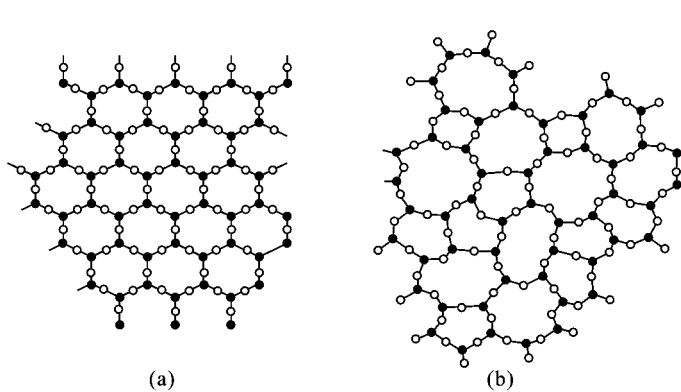


图 1-2 物质内部的平面结构示意图
(a) 晶体; (b) 玻璃(引自潘兆橐等,1993)

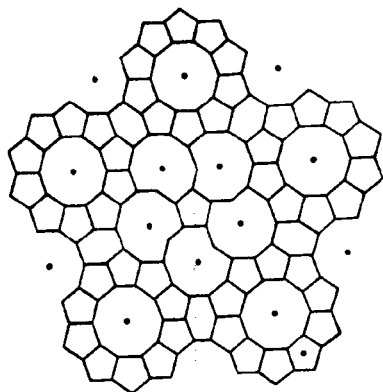


图 1-3 准晶态结构示意图
(据彭志忠,1985)

(三) 准晶体的概念

1984 年,人们在用电子显微镜等现代高科技仪器进行科学研究中,发现了一种物质状态,其质点的排列是规则的,但质点无法在三维空间作周期性平移重复,见图 1-3。即其结构不具有格子构造规律。这种物质被称为准晶态或准晶体。从结构特点可看出,准晶体是处于晶体与非晶体之间的一种过度状态的物质。

(四) 晶体、非晶体之间的转化

从上述可知,晶体与非晶体之间有着本质的区别,但二者之间可在一定的环境条件下相互转换。非晶体可以自发地转变为晶体,如地球上的火山玻璃是非晶体,随着时间的延续可自发地转变为结晶体,这种作用被称为晶化作用或脱玻化作用;地球上也可以发生晶体转变为非晶体,但这个转变则需要提供能量才能实现。这个转变是个不稳定的转变,如含放射性元素的锆石晶体由于放射性元素的衰变释放出能量而变成非晶体水锆石,这种作用被称为非晶化作用或玻化作用。

二、晶体空间格子构造规律

(一) 空间格子概念

从上一节可知,晶体的本质是其内部质点在三维空间作周期性重复排列而形成的格子状构造的固体。

这种构造可用格子的几何规律来表征。用来表征晶体内部质点周期性重复排列规律的无限几何图形被称为空间格子,如图 1-4。

自然界的每一种晶体都是按空间格子规律所形成的。但因晶体的内部结构是很复杂的,可含有许多的原子、离子或离子团,导致其分布、重复排列规律比较难以认识,也难以掌握其空间格子规律。为了从具体的晶体结构中找出质点周期性重复排列的规律,找出其空间格子规律,通过对石盐的晶体结构分析来寻找总结出空间格子的构成特征:

(1) 寻找等同点或相当点。在晶体结构中,在一个任意点位置,这个点可以是质点位置(即晶体组成中的元素位置),也可以不是质点位置,但点的周围环境(即周围质点的种类)和几何环境(即周围质点对该位置点的分布方向和距离)都相同时,该点被称为等同点或相当点。例如在石盐的晶体结构中,每一个 Cl^- 点的上下、前后和左右都等距离的分布着 Na^+ 点;同样每一个 Na^+ 点的上下、前后和左右都等距离的分布着 Cl^- 点,这些点被称为等同点。这两类等同点的差别是所有的 Cl^- 点构成一类等同点,所有的 Na^+ 点构成另一类等同点。实际上在石盐晶体结构中的任意一点都是一个不同的等同点。一个晶体结构中可构成无数个等同点和无数类等同点。

(2) 将一类等同点按最近的距离全部用直线连接得到无限几何图形。例如在石盐的晶体结构中,将每一个 Cl^- 点或每一个 Na^+ 点或其他每一类等同点相互连接得到无数个无限立方体状的图形。

(3) 无数类等同点连接成无数个无限的几何图形,而这无数个无限几何图形是等大同形的,取其中一个无限几何图形则构成一个晶体结构的空間格子。例如在石盐的晶体结构中由每一个 Cl^- 点或每一个 Na^+ 点或其他每一类等同点相互连接成无数个无限立方体状图形都是等大同形的。取其中任意一个无限立方体图形则构成石盐结构的空間格子。

从上述对石盐晶体结构分析中可见,任何晶体结构中的等同点的分布则体现出晶体结构中所有质点的平移重复规律。连接一类三维空间分布的等同点可得到空間格子。

(二) 空間格子规律

空間格子是从晶体结构中抽取出来的无限几何图形。它具有以下的构成要素:

1. 结点

空間格子中的点被称为结点,如图 1-5(左)中的圆圈点,为实际晶体结构的相当点。它们仅是标志等同点位置的抽象的几何点,本身并不一定代表实际质点的位置。

2. 行列

空間格子中由结点组成的直线被称为行列,见图 1-5(右)。空間格子中任意两个结点的连线则可决定一条行列。每一条行列上相邻结点的距离被称为结点间距。同一行列中,结点间距是相等;平行行列的结点间距也是相等的;不平行的行列结点间距一般是不相等的,如图 1-6 所示。

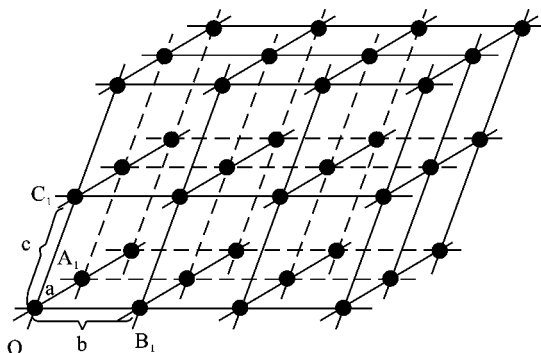


图 1-4 空間格子一般形式(引王永华,1990)

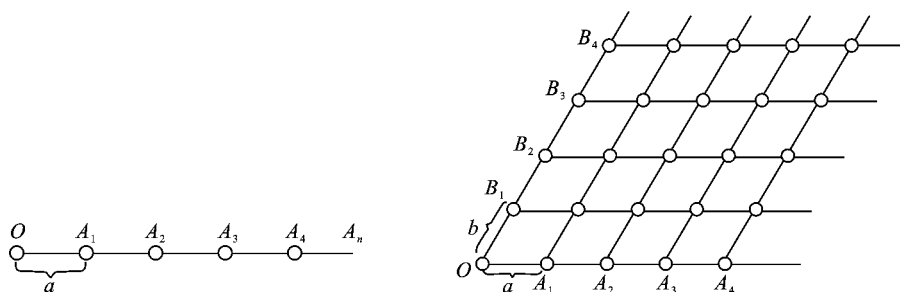


图 1-5 空间格子的结点(左)与行列(右)

3. 面网

结点分布在空间格子中同一平面内被称为面网。在空间格子中,任意两条相交行列可决定一个面网。面网上单位面积内结点的数目被称为面网密度。在空间格子中,相互平行的面网,其面网密度相等,任意两个相邻平行面网的垂直距离(即面网间距)相等;相互不平行的面网,其面网密度一般不相等;任意两个相邻平行面网的垂直距离(即面网间距)一般不相等,并且面网密度大的面网间间距也大;面网密度小的面网间间距也小。如图 1-6。

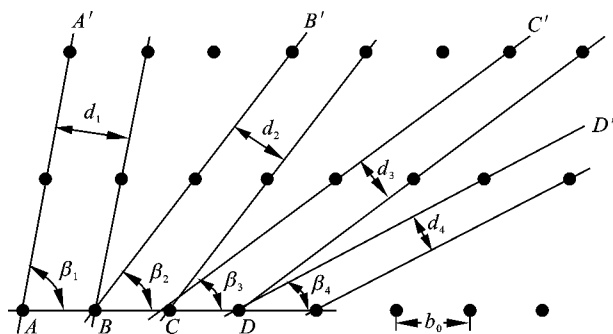


图 1-6 面网密度与面网间距关系示意图(引自罗谷风,1985)

4. 平行六面体

从上述知,空间格子是无限几何图形,它的最小重复单位被称为平行六面体,如图 1-7 (a)。

它由三对平行的面网所组成。在实际晶体结构中所划分出来的最小重复的平行六面体被称为晶胞。整个晶体可视为晶胞沿三维空间平行地紧密堆积而成,见图 1-7 (b)。晶胞的形状与大小则取决于平行六面体的交棱长短和棱之间的夹角。

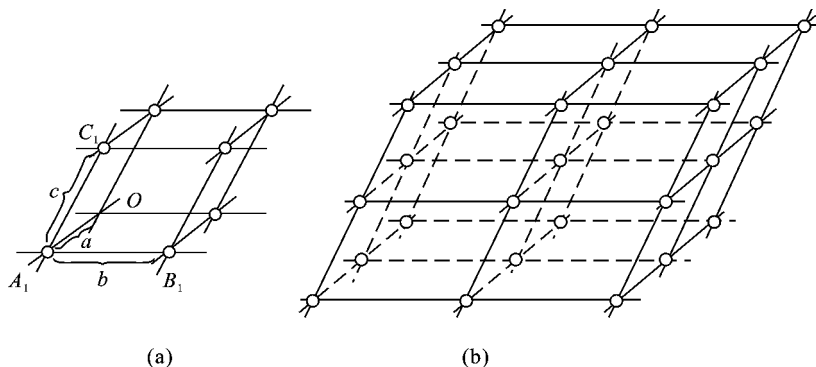


图 1-7 平行六面体(a)与空间格子(b)关系