结晶学与矿物学

第一篇 结晶学基础

第一章 晶体与晶体的基本性质

CRYSTAL AND ITS BASIC PROPERTIES

第一节 结晶学研究对象及其科学地位

INTRODUCTION TO CRYSTALLOGRAPHY

结晶学(crystallography)是以晶体为研究对象，以晶体的生成和变化、晶体外部形态的几何性质、晶体的内部结构、化学组成和物理性质及其相互关系为研究内容的一门自然科学。它主要包括以下分支：

——研究晶体外部几何形态及其规律性的几何结晶学（gometrical crystallography）。

——研究晶体内部结构中质点排列规律及其缺陷的晶体结构学（crystallology）。

——研究晶体发芽、生长和变化过程与机理的晶体发生学（crystallogeny）。

——研究晶体化学组成和结构及其关系的晶体化学（crystallochemistry）。

——研究晶体物理性质及其产生机理的晶体物理学（crystallophysics）。

现代结晶学以与数、理、化等基础学科的高度融合为特征，结晶学不仅是地球科学及其延伸学科的重要专业基础，也是许多其他关乎国计民生的理论和技术科学的重要专业基础。

第二节 晶体、非晶质体与准晶体的概念

CRYSTAL, NON-CRYSTAL AND QUASICRYSTAL

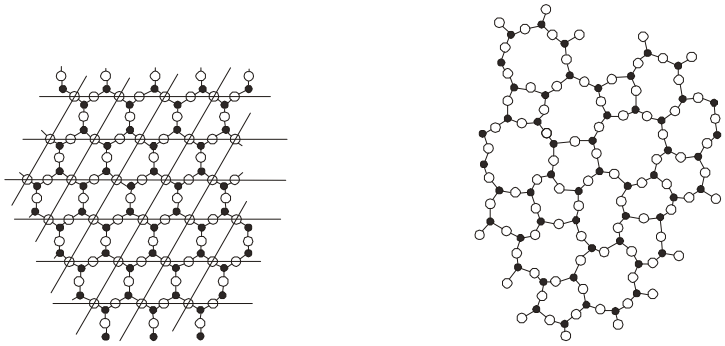
1 晶体与非晶质体

晶体(crystal)的现代定义是：晶体是内部质点在三维空间呈周期性平移重复排列而形成格子构造的固体。

在晶体（图 1-3 a ）中，一种质点（黑点）周围的另一种质点（小圆圈）的排列相同，即每个黑点都被分布于三角形顶点的三个圆圈所围绕，而每个圆圈均居于以两个黑点为端点的直线中央。这种质点局部分布的规律性叫做**近程规律**或**短程有序**（short range order）。不仅如此，晶体中每个质点（黑点或圆圈）在整个图形中各自都呈现规律的周期性平移重复，把周期重复的点用直线联结起来，可获得平行四边形网格。可以想象，在三维空间，这种网格将构成空间格子。这种质点排布方式在整个晶体中贯穿始终的规律称为**远程规律或长程有序**（long range order）。在非晶质体如玻璃体（图 1-3b）中，质点虽然可以是短程有序的（每

中国地质大学（北京）岩石矿物教研室

个黑点为三个圆圈围绕），但不存在远程规律，与液体的结构相似。



a　　b

图 1－3 晶体（a）与玻璃(b)中质点平面分布示意图（潘兆橹等，1993）

在一定的条件下，晶体和非晶质体是可以相互转化的。由非晶质体调整其内部质点的排列方式而向晶体转变的作用，我们称之为**脱玻化（devitrification）**或**晶化(crystallizing)**作用。相反的变化，即晶体因内部质点的规则排列遭受破坏而向非晶质体转化的作用，则称为**玻璃化（vitrification）**或**非晶化(non-crystallizing)**作用。

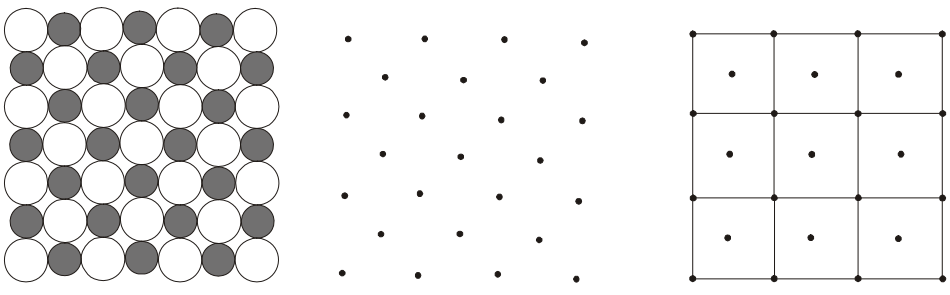
3 准晶体

目前，人们趋向于认为：**准晶体**（quasicrystal）是其质点的排列符合短程有序和分数维特征，有严格的位置序但不体现周期重复，即不存在格子构造的一类固体。

第三节 空间格子
SPACE LATTICE

1 空间格子的导出

在氯化钠的平面结构图（图 1-6a）中，首先任意选择一个几何点，然后在结构中找出所有与此点相当的几何点，即**相当点**。这样一系列相当点的集合，便构成了一个平面点阵（图 1-6b），其中的相当点称为阵点。按照一定法则将这些阵点用直线相连，便能构成一个由平行四边形组成的平面网格（图 1-6c）。



A　　B　　C

中国地质大学（北京）岩石矿物学教研室

图 1-6 氯化钠的平面结构图（a）及其导出的平面点阵（b）和平面网格（c）

所谓“**空间格子**”（space lattice）就是表示晶体内部质点在三维空间作周期性平移重复排列规律的几何图形。它是**空间点阵**（space lattice）中的**阵点**（lattice point）依一定法则相连而成的。空间格子以简捷的形式反映了晶体格子构造的特点，从微观角度看是一种无限图形。

2 空间格子要素及其基本规律

空间格子有结点、行列、面网和平行六面体等 4 种要素。它们的特点和遵循的规律如下：

（1）结点

结点(node)是空间点阵中的阵点，它代表晶体结构中的相当点。

（2）行列

分布在同一直线上的结点构成一个**行列**（row）。在同一条行列上任意两个相邻结点之间的距离，称为**结点间距**(row-spacing)。

（3）面网

联结分布在同一平面上的结点便构成一个**面网**（net）。空间格子中不在同一行列的任意 3 个结点或两个相交的行列可以决定一个面网。面网上单位面积内结点的密度称为**面网密度**（reticular density）。任意两个相邻面网之间的垂直距离称为**面网间距**(interplanar spacing)。

（4）平行六面体

空间格子中可以划分出一个最小的重复单位，那就是**平行六面体(parallel hexahedron)**（图 1-9）。它由 6 个两两平行且相等的面组成。在实际晶体结构中，与空间格子中单位平行六面体相对应的部分称为**单位晶胞**（unit cell）。

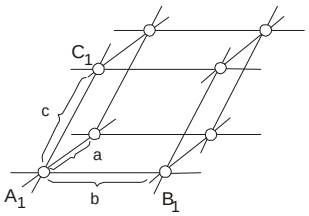


图 1-9　平行六面体

第四节　晶体的基本性质
BASIC PROPERTIES OF CRYSTAL

1 自限性

晶体的**自限性**（self-confinement）是指晶体在合适条件下生长时总能自发地形成具有

中国地质大学（北京）岩石矿物教研室

一定凸几何多面体外形的性质。在晶体的凸几何多面体上，平整的面称为晶面，两个晶面的交线称为晶棱，晶棱会聚成的尖顶称为角顶。

2 均一性

晶体的**均一性**（homogeneity）是指同一晶体的任何部位其性质是完全相同的。

非晶质体也具有均一性。

3 异向性

晶体的**异向性**（anisotropy）指晶体的性质因观察方向的不同而表现出差异的特性。同一矿物在不同方向上其解理的发育程度存在明显的差别，其中最明显的例子是蓝晶石。在平行蓝晶石晶体延长方向上，其硬度值为约 4，而在垂直晶体延长方向上，其硬度值约为 6，故蓝晶石又被称为二硬石。

4 对称性

晶体的**对称性**（symmetry）是指晶体中的相同部分或性质在不同的方向或位置上有规律地重复出现的特性。

5 最小内能性

晶体的**最小内能性**（minimum internal energy）是指相同的热力学条件下，晶体的内能应为最小。

6 稳定性

晶体的稳定性（stability）是指，对于化学组成相同、但处于不同物态下的物质而言，以晶体最为稳定。

中国地质大学（北京）岩石矿物教研室