金属X射綫学

陈汴琨　曹斌　编

北 京 航 空 学 院

1964.1

緒論

金属X射綫学是利用X射綫来研究金属內部的組織与結构的科学。

1895年德国物理学家倫琴首先发現了X射綫。由於X射綫波长短，能量大，穿透力强的特点，X射綫首先被广泛应用於医学中，目前已在各工业部門及許多科学領域內也获得极为广泛地应用。

第一种应用是X射綫探伤：利用X射綫穿透力强的特点来檢驗各种制件內部的缺陷（如金属制件中的縮孔、气孔、裂縫等）。这种檢驗对制件毫无损伤，是檢驗重要另件的質量、揭示各种缺陷出現規律的有力工具，它在改进工艺操作技術方面有很大意义。在航空工业上X射綫探伤技術尤其不可缺少。

第二种应用是用X射綫譜分析，利用X射綫作元素微量、半微量的定性及定量分析。此方法与光譜分析类似。各种元素当被高速电子轰击时都会发出它自已特有的X射綫譜。根據这些譜綫就能够判定某种元素是否存在，而根據这些譜綫的强度就可以测定元素含量的多少。

第三种应用是X射綫結构分析：利用X射綫研究晶体中原子排列的点陣类型、原子間距以及各种物理化学过程所引起的晶体結构变化等等。这部分也是本課程研究的主要对象。

X射綫結构分析法是以射綫通过晶体时所产生的衍射現象为基礎的。由於結晶物体質的原子間距和X射綫的波长属於同一数量級（10^{-8} 厘米），因而結晶物質的空間点陣可以作为X射綫的天然“光栅”。由於不同物質的結晶点陣及原子間距不同，衍射图案不同，因此可以根據衍射图案判斷物質的結构。与此同时，同一物質，在发生物理化学过程（形变、相变、介質作用等）前後的点陣結构有所差異，在衍射图案上便有一定的反映。将衍射图案的变化和材料性能（物理性能、化学性能、力学性能等）的变化联系起来，便可推断在材料中所 学过程的本質和机理。这对深入了介各种金属材料的合金 过程有着极其重要的意义。

1913年俄国結晶学家Г·В·吳立夫和英国物理学家布拉格父子同时在不同地方推出了X射綫在晶体內衍射的最簡单的基本公式，从而奠定了晶体X射綫研究的基礎。目前，X射綫結构分析已发展成为一門完整的科学。

在金属材料的研究中应用X射綫分析法可以确定合金內含有什么相和这些相的相对含量；确定固溶体的点陣类型及溶介度；建立合金平衡图；测定

晶粒大小、残余应力；研究塑性变形，回复及再結晶过程；测定金屬内的織构；研究合金在热处理过程中的結构变化等等。应該指出，在广泛应用X射綫結构分析法之後，上述各方面的研究是得到更为深刻的了介。此外，还有許多金属学中的重要問題。如馬氏体的本性及轉变机理，时效过程、超結构等，目前大都是依靠X射綫結构分析而得到最後的結論。虽然如此，X射綫結构分析的技術、理論仍处在不断发展中。

X射綫探伤和X射綫結构分析是研究金属材料宏观及微观結构的最有力的工具。把X射綫法和金相法、各种物理化学分析等研究方法結合起来，使我們能够揭开金属材料内部的許多秘密，帮助我們正确制定合金的成分，改善各种加工处理的工艺制度，从而提高金属材料的某些性能。

本課程的主要目的在於掌握X射綫物理基础，基本研究方法及有关理論，了介X射綫在金属研究中的方法、原理、特点，以便在今後能够介决金属材料研究和生产中的有关問題。

第一章 晶体学基础

X射綫晶体結构分析法是研究金属内部結构的一种很重要的方法。在討論这种方法之前，必須具备一些有关晶体学的基本知識。

本章将介紹一些有关的晶体学的基本概念，这些是：晶体空間点陣、晶体位向表示，晶体中点綫面关系的幾何公式、晶体投影，以及倒易点陣的概念。

第一节晶体的空間点陣

晶体与非晶体的差别主要在於它們是否具有規律排列的内部結构。凡是物質内部結构中的質点（原子、离子、分子等）作規律排列的固态物体，称之为晶体，例如金属、合金、盐类等。相反，凡是物質内部結构中的質点不作規律排列的固态物体称之謂非晶体，例如玻璃，松香、硬橡胶等。

晶体是本課程研究的对象。若晶体是由一个晶体組成称单晶体（单晶）；若晶体是由一个以上的晶体組成称多晶体（多晶）。

晶体内部質点有規律排列的特点（周期性），因而在单晶的性能上反映出各向異性的特点，而在外形上又反映出对称性的特点。

在晶体学上用来描述內部結构質点有規律排列是空間点陣（或結晶点陣、結晶格子）。空間点陣的严格定义应包含如下三个含意义①空間点陣是晶体結构結点抽象出来的三維排列。②空間中等同点周圍环境（物質上与幾何上）也应等同 。③空間点陣必須是无限的，靜止的。

图 1—2很清楚地表明，A B晶体与 A_2 B晶体之晶体結构不同，但是两者的空間点陣相同。

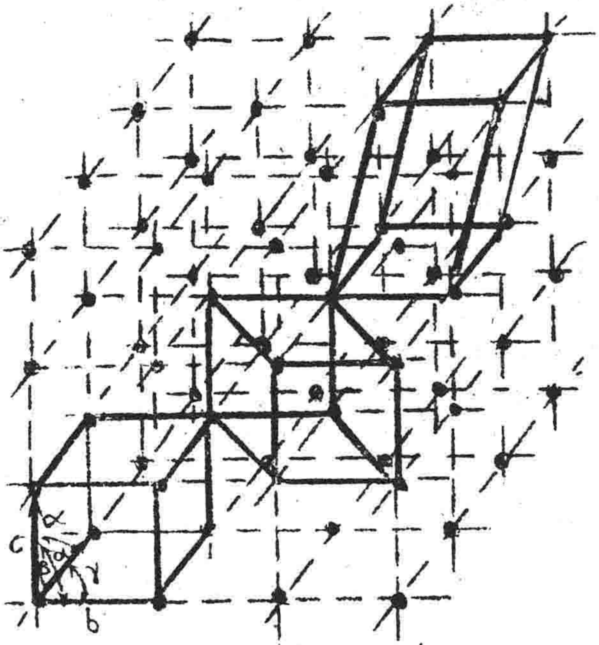


图 1—1晶体点陣（实綫包圍的为幾种可能的单位晶胞）

图 1—1为晶体空間点陣。不同晶体有不同的空間点陣，作为研究点陣中最基本的，最簡单的单元是单位晶胞。图 1—1中实綫所包的体积就是可能的单位晶胞。用来表征单位晶胞的参数是：a、b、C 、α、β、γ。只有这六个参数一定，則单位晶胞大小形状一定。

为了正确选取单位晶胞，应遵循以下原則：①首先选能充分表明空間点陣的单元的平行六面体。②在滿足上述条件下，应使所选平行六面体的平面角尽可能等於直角。③在滿足上述两条件下，应选体积最小的平行六面体。

經过对实际晶体之观察分类，後經数学証实，自然界所有晶体归納为32种对称型，共可分七个晶系，共有14种晶胞点陣类型。

这七个晶系的参数是：

1. 立方晶系：$a = b = C$；　$\alpha = \beta = \gamma = 90^0$
2. 正方晶系：$a = b \neq C$；　$\alpha = \beta = \gamma = 90^0$
3. 斜方晶系：$a \neq b \neq C$；　$\alpha = \beta = \gamma = 90^0$
4. 六方晶系：$a = b = C$；　$\alpha = \beta = 90^0$　$\gamma = 120^0$
5. 菱面晶系：$a = b = C$；　$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^0$

6.单斜晶系：$a \neq b \neq c$；
$\alpha = \gamma = 90^{\circ}$ $\beta \neq 90^{\circ}$

7.三斜晶系：$a \neq b \neq c$；
$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{\circ}$

图1—3是七种晶系的簡单晶胞，其中a是三斜系，b是单斜系，c是斜方系，d是正方系，e是立方系，f是六方系，g是菱面晶系。

絕大多数的金屬和一些其他的結晶物質都比上述簡单点陣更复杂一些。较复杂的結晶点陣是：体心立方点陣，面心立方点陣和密集六方点陣。他們的单位晶胞的形状如图1—4所示。

在体心立方点陣的单位晶胞中，立方体的中心均有一个原子，看起来好象由九个原子組成，但实际上只有两个（$8 \times \frac{1}{8}$原子＋1中心原子＝2）。因为位於角上的每一原子均分别同时为8个彼此相邻的晶胞所共有。同理的計算，面心立方晶胞內共含有4个原子（$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$），密排六方晶胞內共含6个原子（$12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6$）。

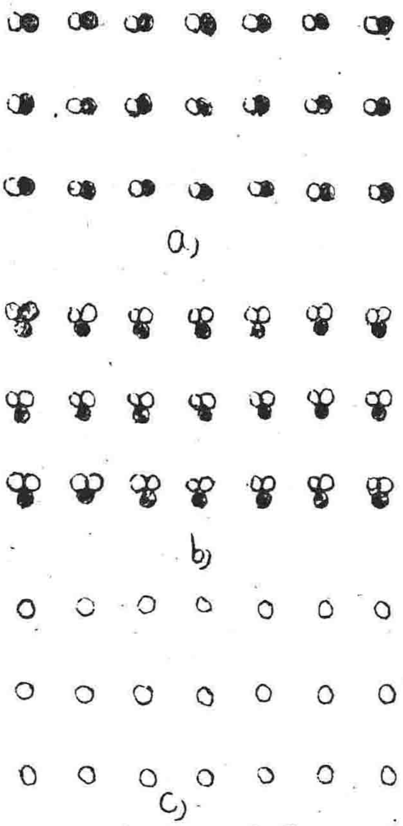


图1—2 a) 为AB晶体点陣
b) 为A_2B晶体点陣
c) 为AB，A_2B之空間点陣

（图3、4見下頁）

第二节晶体的定向

在晶体学中，把晶体对称图形引入座标系的手續称为晶体的定向。

为了对空間点陣中的点、綫、面有一个共同的规　定，晶体学採用数字指数来表示。

結点的表示：点陣中的結点表示是以該点的座标值为代表，用〔〔X，y，Z〕〕符号表示。

图1—5中a，b，c分别为簡单立方、面心立方、体心立方的单位晶

胞。現在看一下R点在这种情况下的表示。

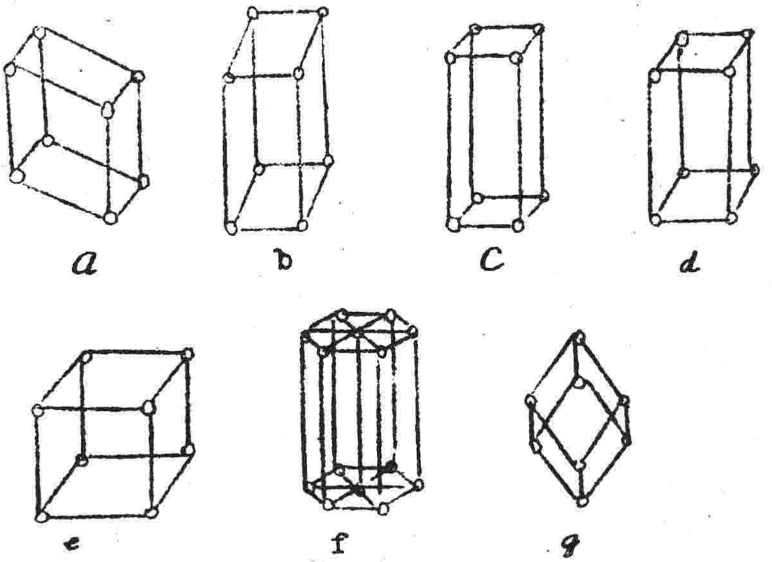


图1—3簡单晶胞的形状

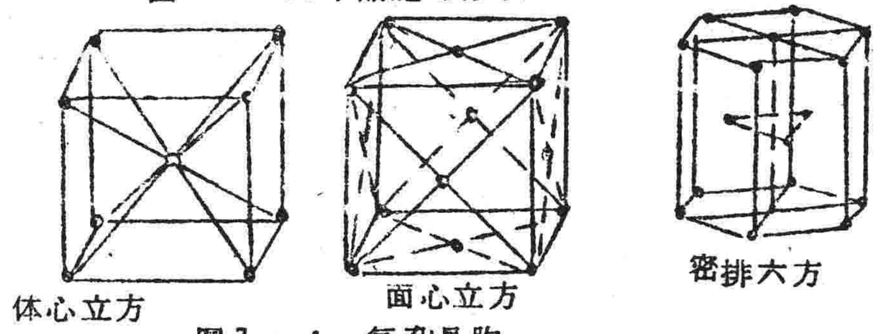


图1—4 复杂晶胞

a）$\overline{OR} = X\overline{a} + y\overline{b} + z\overline{C}$

R点表示为〔〔X，y，z〕〕。对於立方系这时R点表示为〔〔111〕〕。

b）$\overline{OR} = \frac{x}{2}\overline{a} + \frac{y}{2}\overline{b} + 0\overline{C}$

R点表示为〔〔$\frac{x}{2}$，$\frac{y}{2}$，0〕〕。对於立方系这时R点表示为〔〔$\frac{1}{2}$，$\frac{1}{2}$，0〕〕。

C）$\overline{OR} = \frac{x}{2}\overline{a} + \frac{y}{2}\overline{b} + \frac{z}{2}\overline{C}$

R点表示为〔〔$\frac{x}{2}$，$\frac{y}{2}$，$\frac{z}{2}$〕〕。对於立方系这时R点表示为〔〔$\frac{1}{2}$，$\frac{1}{2}$，$\frac{1}{2}$〕〕。 射⑧

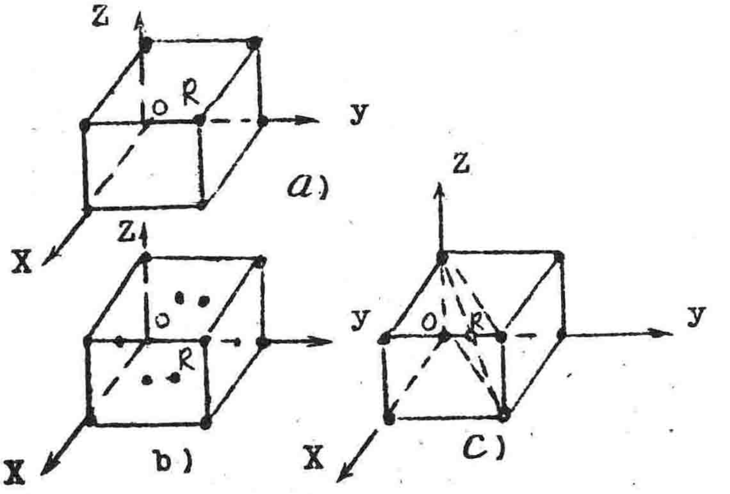
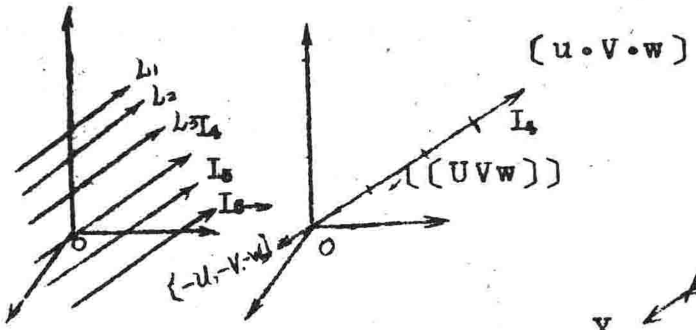


图 1—5 結点 R的表示



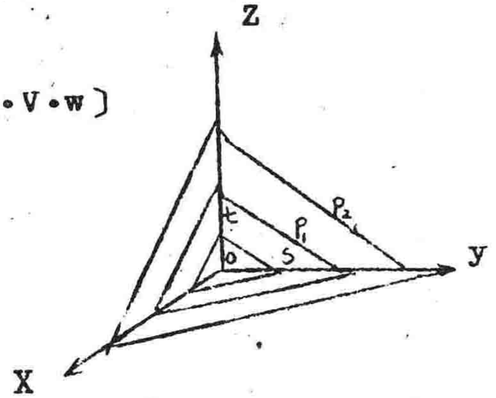


图 1—6 結点直綫 L的表示　　　图 1—7 結点平面 P的表示

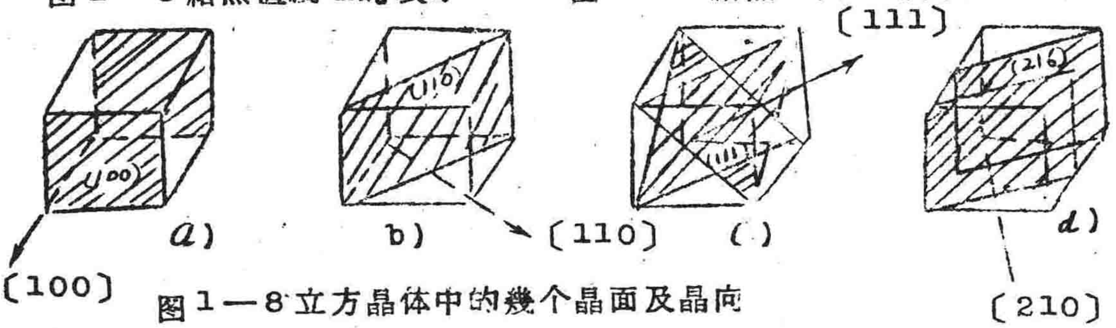


图 1—8 立方晶体中的幾个晶面及晶向

結点直綫的表示：是以該綫族中的一根通过原点 0 的直綫为代表，以这条結点直綫上距原点最近的結点座标表示。用〔u, v, w〕符号表示图 1—6 示結点直綫 L的表示为〔u, v, w〕。

若同一直綫，方向相反，則方向指数相应改变为〔$-u$, $-v$, $-w$〕。

結点平面方向的表示：結点平面的指数确定是比較复杂，通常的选定是这样：

①如确定結点平面族 P 的指数見图1—7。选P面族中离座标原点O最近的結点平面 P_0 方向做代表。②求 P_0 面在参数座标系統上的截距（r，S，t），为了避免出現∞，而採用截距的倒数（$\frac{1}{r}$，$\frac{1}{S}$，$\frac{1}{t}$）。③取$\frac{1}{r}$，$\frac{1}{S}$$\frac{1}{t}$分母最小公倍，通分之並簡化分子为最小整数为h，k，l，則 P_0 面的方向指数（或称面指数）为（hkl）。

例如在立方晶系的晶面及晶向的表示：

图1—8中a）表示（100）与〔100〕，b）表示（110）与〔110〕C）表示（111）与〔111〕，d）表示（210）与〔210〕。

应該指出，所有相互平行的結晶面的晶面指数皆相同，但有时由於結晶面位於原点O的这边或那边，以致某些指数的符号可能不同。結晶学中晶面指数的絕对值相同，但符号及排列次序不同的一切結晶面对称为一个面簇，以{hkl}表示。例如立方系中{100}代表着：（100），（010），（00），（$\bar{1}$00），（0$\bar{1}$0）（00$\bar{1}$）等六个結晶面（立方体面）。

对於六方晶系的定向採用三个座标是不够的。例如图1—9a）中的P及Q面本是同一面簇的結晶面，但採用三軸系統表示将出現为P面表示为

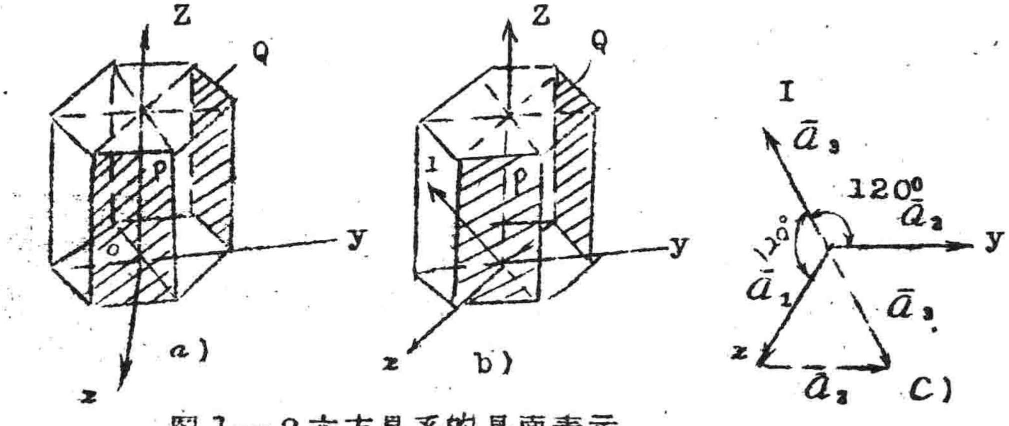


图1—9六方晶系的晶面表示

（100），而Q面表示为（$\bar{1}$20）。

为了补救由於三軸系統而出現的不合理　現象，而採用了四軸系統（X，y，Z，I），其中X，y，Z，I軸之間各間隔120°，而与Z軸成90°（見图1—9b）。

射

这时，由图1—9C幾何关系知，X，y，I 軸单位向量a_1，a_2，a_3之間呈如下关系：

$$\vec{a}_1+\vec{a}_2=-\vec{a}_3 \qquad \vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3=0 \cdots\cdots\cdots\cdots (1-1)$$

六方晶系中的点、綫、面指数确定方法与上述规定相同，不过是按四軸系統确定指数。这时結点符号为〔〔X，y，I，Z〕〕，結点直綫方向指数为〔u，V，S，W〕，結点平面指数为（h$k$$i$$l$）。

由於（1—1）式关系，i=－（h+k），实际上i为不独立的，有时对於六方晶系的晶面指数可以这样表示：（hk·l）— 这时图1-9b）中P面表示为（10$\bar{1}$0），而Q面表示为（$\bar{1}$100）。

第三节 点陣几何学的基本公式

在解决X射綫晶体結构分析的各項問題时，往往需要計算相邻結晶面之間的距离，二結晶面之間的夹角，結晶学上不同方向的夹角，直綫与平面間的夹角等等，这节主要是介紹这些数学关系式，数学式的推导請参照参考书。

晶面法綫的方向：在解决某些結构分析的問題时，晶面的位置常常用其法綫的方向来表示。

假設点陣常数为a，b，C晶面指数为（h$k$$l$），晶面的法綫与X，y，Z三軸之夹角分别为$\alpha$，$\beta$，$\gamma$。

$$\left.\begin{aligned}
\text{則：}\quad \cos\alpha &= (h/a)/\left(\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{C^2}\right)^{\frac{1}{2}}\\
\cos\beta &= (k/b)/\left(\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{C^2}\right)^{\frac{1}{2}}\\
\cos\gamma &= (l/C)/\left(\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{C^2}\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}\right\}\cdots\cdots (1-2)$$

对於立方晶系：　a=b=C

則晶面法綫的方向余弦为：

$$\left.\begin{aligned}
\cos\alpha &= h/(h^2+k^2+l^2)^{\frac{1}{2}}\\
\cos\beta &= k/(h^2+k^2+l^2)^{\frac{1}{2}}\\
\cos\gamma &= l/(h^2+k^2+l^2)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}\right\}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (1-3)$$

可知，立方晶系的晶面法綫的方向余弦与該晶面的面指数成正比。

晶面間的距离：二相邻平行的晶面之間的垂直距离簡称为面間距d。面

間距d的大小等於由座标原点所引起的垂直於此面簇中离原点最近之面的綫段的长度。

如图1—10所示，若ABC为$\{hkl\}$面簇中离原点O最近的晶面。OK为通过原点O並垂直於ABC面的綫段，則$\{hkl\}$面簇中各晶面之間的距离d即等於$|OK|$之长。

这时OK与X，y，Z之夹角分别为α，β，γ，OA、OB、OC长度分别为$\frac{a}{h}$，$\frac{b}{k}$，$\frac{c}{l}$。

若正交晶系，則 $\cos^2\alpha+\cos^2\beta+\cos^2\gamma=1$

因为
$$\left.\begin{aligned}\cos\alpha&=\frac{OK}{OA}=\frac{d}{OA}=d/(a/h)\\ \cos\beta&=\frac{OK}{OB}=\frac{d}{OB}=d/(b/k)\\ \cos\gamma&=\frac{OK}{OC}=\frac{d}{OC}=d/(c/l)\end{aligned}\right\}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(1-4)$$

将此关系代入上式化簡後便得在正交晶系中晶面間距的普遍形式：

$$d=\left[\left(\frac{h}{a}\right)^2+\left(\frac{k}{b}\right)^2+\left(\frac{l}{c}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(1-5)$$

若是立方晶系，$a=b=c$

則 $d=a/(h^2+k^2+l^2)^{\frac{1}{2}}$ ……………………（1—6）

若是正方晶系，$a=b\neq c$

$$\text{則}\quad d=\left(\frac{h^2+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(1-7)$$

其他晶系的面間距公式比較复杂，这些是六方晶系：

$$d=\left[\frac{4}{3}\left(\frac{h^2+hk+k^2}{a^2}\right)+\frac{l^2}{c^2}\right]^{-\frac{1}{2}}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(1-8)$$

菱面晶系（三角晶系）：

$$d=\frac{a\sqrt{1-3\cos^2\alpha+2\cos^3\alpha}}{\sqrt{(h^2+k^2+l^2)\sin^2\alpha+2(hk+kl+lh)(\cos^2\alpha-\cos\alpha)}}$$
……………………（1—9）

单斜晶系： 射

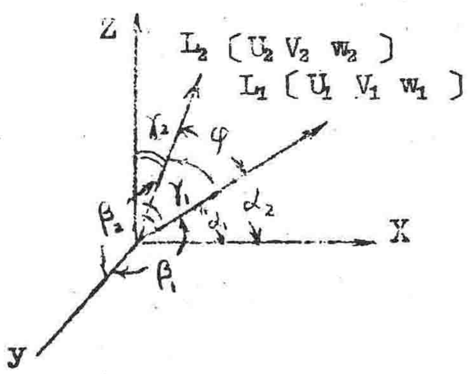


图1－11二直綫夹角

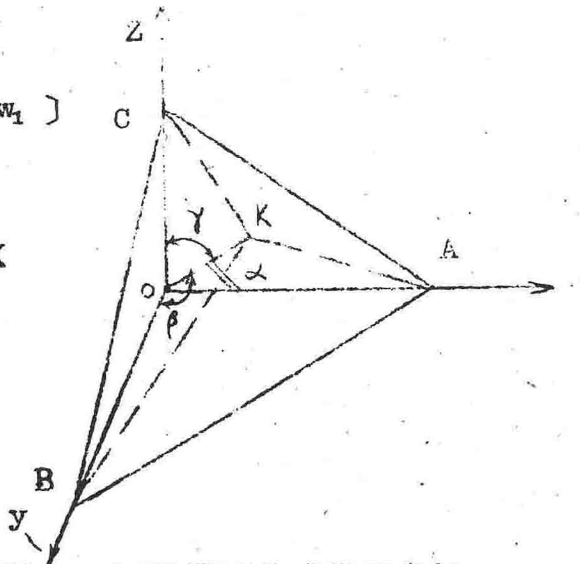


图1－10面間距公式推导幾何

$$d=\left[\frac{\left(\frac{h}{a}\right)^2+\left(\frac{l}{c}\right)^2+\frac{2hl\cos\beta}{ac}}{\sin^2\beta}+\left(\frac{k}{b}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(1\text{—}10)$$

三斜晶系：

$$\begin{aligned}d=V/[&h^2(b^2c^2\sin^2\alpha)+k^2(c^2a^2\sin^2\beta)+\\&+l^2(b^2a^2\sin^2\gamma)+2hk\cdot c^2ab\\&\cdot(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)+2hl\cdot b^2ca(\cos\alpha\cos\gamma-\\&-\cos\beta)+2hl\cdot a^2bc(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)]^{-\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(1\text{—}11)$$

二直綫間夹角：

图1—11示，L_1 与 L_2 直綫皆通过原点，他們与座标軸之夹角分别为 α_1 β_1 γ_1 与 α_2，β_2，γ_2。L_1 与 L_2 直綫間之夹角为 φ，據解析幾何定理求得：

$$\cos\varphi=\cos\alpha_1\cos\alpha_2+\cos\beta_1\cos\beta_2+\cos\gamma_1\cos\gamma_2\quad\cdots\cdots(1\text{—}12)$$

據（1—3）式可推导得：（限於正交晶系）

$$\cos\alpha=\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}=\frac{U\cdot a}{\sqrt{U^2\cdot a^2+V^2\cdot b^2+W^2\cdot c^2}}$$

$$\cos\beta=\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}=\frac{V\cdot b}{\sqrt{U^2\cdot a^2+V^2\cdot b^2+W^2\cdot c^2}}\quad\cdots\cdots(1\text{—}13)$$

$$\cos\gamma=\frac{Z}{\sqrt{x^2+y^2+Z^2}}=\frac{W\cdot C}{\sqrt{U^2\cdot a^2+V^2\cdot b^2+W^2\cdot C^2}} \quad \cdots\cdots(1\text{—}13)$$

代入（1—12）式便可求得：

$$\cos\varphi=\frac{a^2\cdot U_1U_2+b^2\cdot V_1V_2+C^2\cdot W_1W_2}{(a^2U_1^2+b^2V_1^2+C^2W_1^2)^{\frac{1}{2}}(a^2U_2^2+b^2V_2^2+C^2W_2^2)^{\frac{1}{2}}}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots(1\text{—}14)$$

对於立方系，$a=b=C$

$$\text{故}\quad \cos\varphi=\frac{U_1U_2+V_1V_2+W_1W_2}{(U_1^2+V_1^2+W_1^2)^{\frac{1}{2}}(U_2^2+V_2^2+W_2^2)^{\frac{1}{2}}} \quad \cdots\cdots(1\text{—}15)$$

直綫与平面之間的夹角：

图1—12示，設面指数为（hkl）的平面P与方向指数为〔U，V，W〕的直綫L之間的夹角为ψ。設平面P法綫NK与直綫L之間的夹角为φ。

則直綫L与平面P之間的夹角ψ可以認为該直綫L与平面法綫NK所成角度的余角，

即： $\psi=90^0-\varphi$

由NK之方向余弦可由（1—3）式求得，L直綫之方向余弦也可由（1—13）式中求出，共同代入（1—14）式得：

$$\cos\varphi=\sin\psi=\frac{hU+kV+lW}{\left(\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{C^2}\right)^{\frac{1}{2}}(a^2U^2+b^2V^2+C^2W^2)^{\frac{1}{2}}}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots(1\text{—}16)$$

对於立方系，$a=b=C$，

$$\text{故}\quad \sin\psi=\frac{hU+kV+lW}{(h^2+k^2+l^2)^{\frac{1}{2}}(U^2+V^2+W^2)^{\frac{1}{2}}} \quad \cdots\cdots(1\text{—}17)$$

晶带与晶帶軸：

在晶体中如果許多晶面簇同时平行一个軸向时，則前者許多晶面总称为屬於同一个晶带，而後者都同时平行的軸向称为該晶带的晶带軸。

图1—13示，屬同一晶带的晶面是：（100），（010），（110），（（$\bar{1}$10）（1$\bar{1}$0）（$\bar{1}\bar{1}$0），（210），（$\bar{2}$10）……等，晶带軸〔001〕。

若晶带軸方向指数为〔U，V，W〕，則凡屬这一晶带的晶面指数（hkl）

必須符合下列条件：

晶带条件为 $hu+kV+lW=0$ ……………………(1—18)

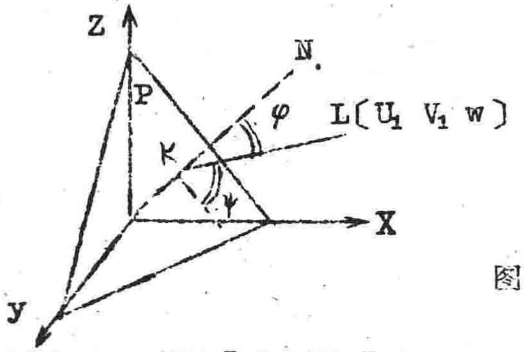


图 1—12 直綫 L 与平面 P 之夹角幾何

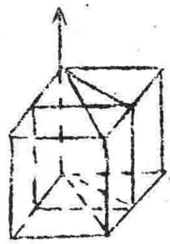


图 1 — 13 晶带与晶带軸

若（h_1 k_1 l_1）和（h_2 k_2 l_2）是同一晶带之两个晶面簇，則晶带軸指数〔u，V，W〕为：

$$u=k_1l_2-k_2l_1 \quad V=l_1h_2-l_2h_1 \quad W=h_1k_2-h_2k_1$$

若有一晶面同时属於两个晶带軸分别为〔$U_1V_1W_1$〕〔$u_2V_2W_2$〕。則該晶面指数为：

$$h=V_1W_2-V_2W_1 \quad k=W_1u_2-W_2u_1 \quad l=u_1V_2-u_2V_1$$

第四节晶体对称性概念

晶体的外形和晶体的內部結构都有一定的对称性，晶体对称性的概念无論对研究晶体的外形或晶体的內部結构都很重要。

如果将一个形体（幾何图形或空間点陣）的每一点按照某一幾何图形規則移动时，物体的新位置与原位置重合复原，則我們說这个形体是对称的，其幾何动作称为“对称动作”。

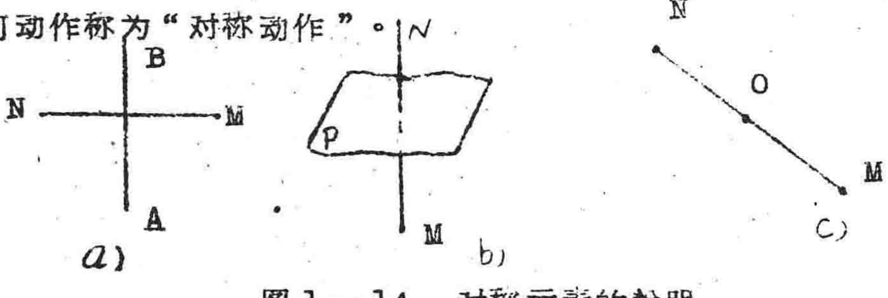


图 1 — 14 对称元素的說明

評定物体或图形的各相等（或相当）部分是否对称，必須选擇一定的点、綫（軸）或平面来作基准。例如图 1—14 中的 N 和 M 点是对称的，但这是对 A B 綫（图 1—14a））、对 P 平面（图 1—14b）），对 O 点（图 1—14 c））而言的。这种为了評定物体或图形的相等部分是否对称所必須选定的

点（称为对称中心）綫（称为对称軸）或面（称为对称面）为輔助的幾何元素統称为对称元素。

为了判定物体或图形的相等部分是否对称，即是否按一定的规律重复，除需要选擇上面所說的对称元素外，还需要一定的对称动作，經过这种动作後，如果物体或图形回复了原来的形状則可以肯定物体或图形是对称的。

对称动作有旋轉，反映，倒反等等。例如图1—15a）所示。它是由三个相等部分組成，如果把图形繞垂直於紙面且通过O点之軸旋轉 $\frac{2\pi}{3}$，則图形並无任何改变，此时的对称动作即为旋轉。对称元素为通过O点且垂直

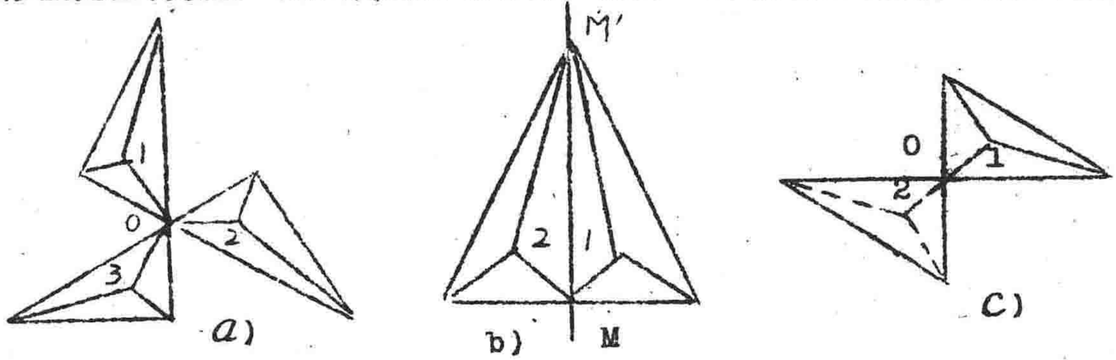


图1—15 对称动作 a）旋轉 b）反映 C）倒反

於紙面的軸（对称軸）。

在图1—15b）中垂直紙面且通过MM的平面将象一面鏡子，图形的一部分(2)是另一部分(1)所反映的鏡像，此时的对称动作为反映。对称元素为垂直於紙面且通过MM′的平面（对称面）。在图1—15C）中的O点为对称中心，从图形的部分1上的任何一点作直綫並通过O点，在相反方向上与O等距离的地方的点与原来的点完全相同，此时的对称动作为倒反。

对称中心就是形体內部某一定点O任何穿过該点的直綫在距此点等远的兩端。对立方晶系而言，对称中心就是立方体的二空間对角綫的交点。

对称面就是形体內“存在”某一个面，这个面把形体分成互为映像的两部分。在立方晶体中共有九个对称面：四个垂直的，一个水平的和四个傾斜的，如图1—16所示。其他晶系对称面却較少。

对称軸是这样的假想直綫，当形体圍繞此綫旋轉一定角度後的形体和原来的形态相合。为了表示一种对称軸的特征，必須找出使形体与原来的形态相重合时所必須轉动的最小角度，这个角度称为基轉角。旋轉一周（2π）

射

形体重复出現的次数称为对称軸的次数。

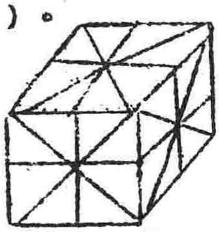
因此若以Ⅱ表示軸的次数，α表示基轉角，則

$$\alpha=\frac{360^{0}}{\text{II}}$$

可以証明晶体中仅有下列五种不同次数的对称軸，一次、二次、三次、四次、六次。这些軸的名称，基本旋轉角的数值以及它們的表示方法如下表所示：

对称軸的名称	符号	对称軸的次数Ⅱ	基轉角α
一次	C_1	1	360^0
二次	C_2	2	180^0
三次	C_3	3	120^0
四次	C_4	4	90^0
六次	C_6	6	60^0

立方晶系具有最多的对称軸，共計有三个四次軸（3 C_4）六个二次軸（6 C_2）。



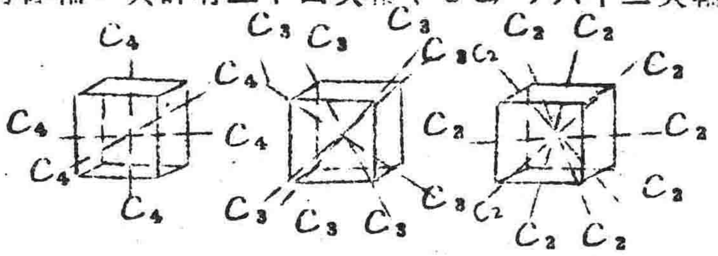


图16立方晶系对称面　　图17立方体的对称軸

其他晶系晶体的对称軸都比較少，例如正六方柱只有一个六次对称軸和六个二次对称軸。

第五节　晶体投影

由於晶体学研究的需要，要求有一种通用的而且是簡单明了的晶体投影方法是十分重要的。

同一种物質，由於結晶所受外界影响不同，所得的晶体的外形可能有很大差異，因为它們之間的晶面的数目与大小都可能不同。应該指出，同种物質的晶体外形尽管可以不同，但其相当的晶面之間的夹角总是始終不变的，这就是所謂面角恒等定律。

同种物質的各对应晶面之間的夹角既然不变，那么各对应晶面的法綫之

間的交角也必然不变。只要把晶面法綫的方向表示出来，晶面的交角，自然也就可以表示出来。法綫在空間的分布还可以准確地表示出晶体上各晶面的相对位置。晶体投影便是根據这个原理進行的。

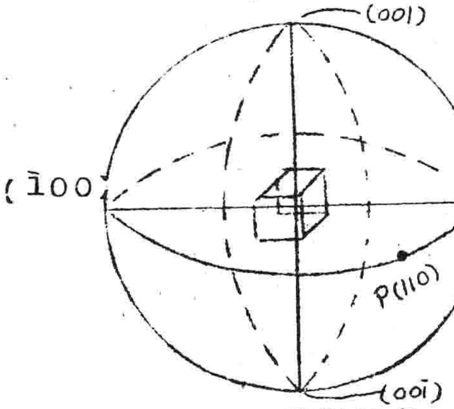


图 1—18 球面投影示意

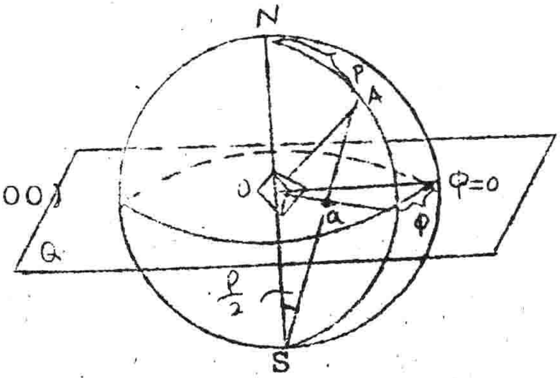


图 1—19 晶面 A 的极射赤面投影

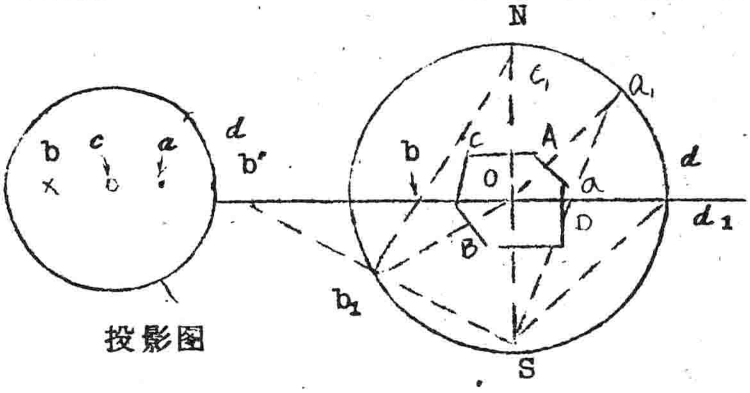


图 1—20 晶体 ABCD 的晶面极赤投影

最簡单的投影方法是球面投影法。即把晶体置於园球中，使晶体的中心与球心相重合。而後作各个晶面的法綫。各法綫与球面的交点即为晶体的球面投影，如图 1—18 所示，根據球面上各投影点的經緯度，便可得出各对法綫的交角，因而也就得出各个面的交角。

球面投影虽然簡单，但作起来极不方便，投影点在空間研究也困难，因此实际上广泛应用的晶体投影法是球面投影再加上赤面平面，称之极射赤面投影法（又称极射基平投影），这种方法的原理如下：

以晶体的中心作投影球，通过球心作一水平的平面 Q，作为投影平面 Q，平面和球面相交的結果得一大园，此大园相当於球的赤道，如图 1—19 所示。

設OA为某一晶面的法綫，此法綫与投影球相交於A点。以球的南极（S）为視点，S与A点的連綫与Q平面交点a即为法綫OA的极射赤面投影。

因此一个方向或者說一条直綫的极射赤面投影为一个点。晶　方向用其法綫方向表示，因此一个晶面的极射赤面投影也是一个点。

图1—20表示晶体ABCD的投影。投影的方法是先作出各晶面的法綫，其綫通过投影球中心，並与球面相交於a，b，c，d等点，从視点S（南极）与交点a_1，b，c，d分别連綫，連綫与投影平面Q分别相交於a，b，c，d等点。由於b'点位於投影园以　外，表示起来不方便，这时，視点应取北极而不取南极，即应該作Nb_1的連綫（不应連Sb_1）Nb_1連綫与投影面的交点b即为晶面B的极射赤面投影。

如果所得到的投影点是从南极为視点，則以此記号“O”表之，如d，a，c点。反之如果所得到的投影点是以北极为視点則以“×”表示之，如图　　中的b点，以資区别。

从上面这个例子，可以知道水平的晶面之投影位於投影图之中心（如图1—20中的晶面C），沿鉛直的晶面投影落在投影园上（如图1—20中的晶面D），傾斜晶面之投影落於投影图內（例如图1—20中的晶面A及B），而且傾斜度越大（即晶面与投影軸SN間之夹角越小），則其投影离园周越近，反之（即夹角越大），其投影越近於园心。

晶体投影在实际应用上需要有一个能够反映空間位置的平面座标作为工具，这就是俄國晶体学家Г·В·吳立夫首先創立的吳氏网。

在球面上的座标就是經度与緯度，如果将这些經緯綫分别向視点作极射赤面投影，便得如图1—21示的吳氏网。

吳氏网上直綫AB称为水平直徑或网赤道，直綫CD称为竪直直徑，园周ABCD为基本园。C、D两点各称为上极与下极。O点是网的中心。在网中，通过网的两极的弦称为經綫，MN型的弧称为緯綫。

利用吳氏网就可以将球面上的問題变作平面上的問題来解決。

吳氏网一般是印在坚固的坚厚紙上，以空間每2°为間隔画出这些弧（都是园弧），这就作定了作图的准確度。将一張透明紙复盖在网上，作图就在这張透明紙上进行，在透明紙上标出网中心与一条直徑端点的位置（如吳氏网的B点），这样就可以进行工作。