

X射线粉末法及其在 岩石学中的应用

叶大年 金成伟 编著

科学出版社

1984

内 容 简 介

本书分为两部分，前一部分阐述了X射线粉末法的基本知识；后一部分是粉末法在岩石学研究中的应用，着重介绍了最主要造岩矿物的研究方法，并附有大量的鉴定图表和研究实例，尤其是对长石、辉石和云母族矿物方面引述了国内的最新研究成果。书后附有必要的函数表和造岩矿物的标准数据。因此，本书基本上能满足岩石学研究的需要。可供地质科研、教学以及找矿勘探人员作为参考书或工具书。对于建材及冶金工作者来说，也有一定的参考价值。

X 射线粉末法及其在 岩石学中的应用

叶大年 金成伟 编著

责任编辑 李增全 谢洪源

科学出版社出版

北京朝阳门内大街 137 号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1984年4月第一版 开本：787×1092 1/16

1984年4月第一次印刷 印张：24 3/4 插页：1

印数：0001—2,000 字数：565,000

统一书号：13031·2539

本社书号：3480·13—14

定 价：3.85 元

前　　言

X射线粉末法已成为最重要的岩矿鉴定的方法之一。在六十年代，由于我国的工业水平所限，全国地质实验室中有X射线仪器设备的为数还不多，因此，X射线粉末法的应用还不十分广泛。随着国家工业水平的提高，近二十年来，大多数实验室都配备了X射线粉末法的照相设备和衍射仪，因而，普及X射线粉末法就有了客观条件。随着地质学研究的深入，特别是岩石学研究的深入，对造岩矿物研究的要求也越来越高，仅仅是光性的测定已远远不相适应，用X射线粉末法研究造岩矿物的重要性就更加突出。作者从自己二十年的工作中深感有必要向国内地质学（尤其是岩石学）工作者普及粉末法的基础知识和它在造岩矿物学中的研究方法。作者之一叶大年曾先后在一些地质局的岩矿学习班、全国硅酸盐学会的学习班以及中国科学技术大学研究生院讲授过这一内容，收到较好的效果。武汉地质学院北京研究生部的苏良赫和彭志忠两位教授建议作者写这部书，目的在于为推动我国的岩石学研究贡献一份力量。

鉴于X射线粉末法在国内的地质院校中仅仅是岩矿专业的必修课，而大多数地质学工作者和现在从事岩矿工作的同志并不熟悉X射线粉末法；造岩矿物学的知识在普通矿物学的教程中内容过于简单，在光性矿物学中又仅仅强调光性鉴定，所以到目前为止，国内的教科书中，造岩矿物的内容远远不能适应岩石学研究的需要。作者在写此书时就顾及这两个实际情况，既介绍了X射线粉末法的基础知识、造岩矿物的晶体化学特征，还着重总结了X射线粉末法在岩石学中的应用，力求给读者一个比较完整的概念和知识。

尽管X射线的仪器设备逐渐增加，但是在今后一个相当时期内，直接操作仪器的岩矿工作者依旧是少数，所以本书不强调仪器的操作，而是着重介绍数据的处理和研究。

因为作者考虑到大多数岩矿工作者的所在单位往往没有完整的X射线粉末法的参考资料和手册，所以在本书中列出了主要的参考数据，力求本书基本上满足岩石学工作者的需要。这样对X射线实验方面的行家看来，此书某些方面显得过于冗长，而某些方面又显不足。我们认为这是难免的，因为读者对象主要是针对岩石学工作者的。

本书第九、十和十三章是金成伟执笔，其余各章均由叶大年完成。

在写作过程中得到邵兴亚、桂文立和王传英同志的大力帮助，易善锋和从柏林等同志的鼓励。赵宗溥教授在百忙中审阅了原稿。作者在此一并致以深切的谢意。

叶大年　金成伟
一九八二年五月一日

目 录

前 言

第一章 晶体和空间点阵	1
第一节 晶体	1
一、晶态和非晶态	1
二、对称性	1
三、对称要素	1
四、晶系	1
第二节 空间格子	2
一、空间格子的概念	2
二、晶胞	2
三、布拉维空间格子	3
四、晶体内部结构的对称要素	5
五、晶体内部结构对称要素的表示方法	6
六、晶体内部结构对称要素组合规律	6
七、点群和空间群	7
八、等效点系	9
第二章 晶体化学的基础知识	10
第一节 离子半径、配位数和配位多面体	10
一、离子半径	10
二、配位数	10
三、配位多面体	14
四、配位多面体的相互关系	15
五、鲍林关于离子化合物结构的法则	16
第二节 化学键的类型	16
一、化学键的定义	16
二、离子键	16
三、共价键	17
四、金属键	18
五、温德华键(余键)	19
六、氢键	19
第三节 类质同象和同质多象	19
一、类质同象的概念	19
二、韦加德定律	20
三、同质多象的概念	20
四、有序—无序过程	21
第四节 等大球的最紧密堆积原理	21
一、立方最紧密堆积和六方最紧密堆积	21

二、最紧密堆积构造的空间占有率和孔隙类型	23
三、等大球最紧密堆积的表示方法	24
第五节 硅酸盐的晶体化学特征	24
一、硅氧四面体	24
二、四面体的聚合	24
三、硅酸盐的晶体化学分类	25
第三章 X射线物理学的基本知识	29
第一节 X射线的本质和X射线的产生	29
一、X射线的本质	29
二、产生X射线的装置	29
第二节 连续X射线光谱和特征X射线光谱	30
一、连续X射线光谱	30
二、特征X射线光谱	31
第三节 X射线与物质的相互作用	33
一、X射线射入晶体后产生的现象	33
二、二次射线	33
三、物质对X射线的吸收和吸收系数	33
四、X射线的选择和滤光片的选择	37
五、质量吸收系数和线性吸收系数的计算方法	38
第四章 X射线的衍射原理和倒易格子	40
第一节 晶体对X射线的衍射	40
一、晶体对X射线的衍射	40
二、布拉格方程	40
三、衍射线的强度	42
第二节 影响衍射线强度的因素	43
一、影响衍射线强度的因素	43
二、结构因子	44
三、多重化因子	45
四、角度因子(即洛伦茨-极化因子)	46
五、温度因子	47
六、吸收因子	47
第三节 系统消光和空间群的测定	47
一、系统消光的概念	47
二、带心格子引起系统消光的证明	47
三、空间群的测定	49
第四节 倒易格子	49
一、倒易格子的概念	49
二、正格子与倒易格子参数之间的关系	51
第五节 反射球和极限球	51
一、反射球的概念	51
二、极限球的概念	52
第五章 X射线粉末法原理及矿物鉴定	53
第一节 粉末法原理	53

一、粉末法原理	53
二、德拜相机	55
第二节 德拜图的测量	57
一、 d 值的计算	57
二、面网间距表的使用	59
三、 d 尺的使用方法	61
四、强度的估计	62
第三节 德拜图中某些现象的解释	63
一、粉末柱没有转动	63
二、样品有择优取向	63
三、粉末柱中样品太少	64
四、粉末样品粒度太小(如 $<10^{-5}$ cm)	64
五、强吸收的影响	64
六、粉末柱对中不好的影响	64
第四节 X 射线粉末法鉴定矿物	65
一、粉末法鉴定矿物的基本程序	65
二、矿物 X 射线粉末图资料和鉴定手册	65
第五节 衍射仪记录法	70
一、衍射仪的基本设备	70
二、衍射仪聚焦的原理	71
三、衍射线的强度分布和衍射角的测量	72
四、衍射线强度的测量	73
五、衍射仪的工作条件参数	74
第六节 其他的照相方法	74
一、细聚焦照相机	75
二、基尼叶式相机	75
三、背射照相机	76
第六章 粉末图的指标化	77
第一节 指标化的目的	77
一、求晶格常数	77
二、用粉末法鉴定类质同象系列的成分	77
三、检查粉末图中是否有杂线存在	77
四、研究“超级构造”——固溶体的有序化	77
五、用粉末法研究晶体结构	77
六、研究金属或岩石的组构变化	78
第二节 晶系已知时粉末图的指标化	78
一、晶格常数和面网间距的关系	78
二、图解法	80
第三节 指标化的解析法	86
一、等轴晶系	86
二、四方晶系	87
三、三方(六方)晶系	90
四、斜方晶系	90

第四节 用倒易格子指标化	94
一、倒易格子的表示方法	94
二、倒易晶胞棱长的确定	95
三、倒易格子轴间角 α^* 、 β^* 、 γ^* 的确定	95
四、伊藤法及其实例	97
第七章 晶格常数的精密测定	102
第一节 晶格常数的测定方法	102
一、等轴晶系的晶格常数	102
二、四方晶系的晶格常数	102
三、六方晶系和三方晶系的晶格常数	103
四、斜方晶系的晶格常数	104
五、单斜晶系的晶格常数	104
六、三斜晶系的晶格常数	105
第二节 粉末图误差引起的原因	106
一、误差的实质	106
二、物理原因引起的误差	106
三、几何原因引起的误差	109
四、精度的极限	112
第三节 晶格常数精密测定的方法	112
一、利用背射区域的衍射	112
二、小心谨慎的实验技术	115
三、内标法	115
四、吸收误差的匹配	116
五、外推法	117
六、最小二乘法	119
第四节 测定精密的晶格常数的实例	122
一、利用高角度的衍射	122
二、加内标法	122
三、外推的方法	123
四、最小二乘法求精密的晶格常数	126
五、单斜晶系晶格常数的计算	128
第八章 定量相分析	130
第一节 定量相分析的理论基础	130
一、X射线粉末法定量相分析的依据	130
二、理论基础	130
三、定量分析的要求	132
第二节 直接定量分析	133
一、直接定量分析的含义	133
二、在N组分混合物中, $\mu_j^* = \bar{\mu}^*$ 的情况	133
三、在两组分混合物中, $\mu_1^* \neq \mu_2^*$ 的情况	134
四、直接法使用的条件	134
第三节 内标法	135
一、内标法的含义和优点	135

二、内标法的原理	135
三、吸收-衍射法	136
四、冲稀法	137
五、基体清洗法 (matrix-flushing method)	138
六、自清洗法 (auto-flushing method)	139
第四节 解析法	139
一、衍射线重叠时的解析法	139
二、多组分混合物中内标与一组衍射线重叠的情况	140
第五节 非晶态相测定	141
一、差减法	141
二、直接测定法	141
第六节 无纯样时的定量分析	143
一、解析法	143
二、掺和法	144
第九章 在岛状、环状硅酸盐研究中的应用	145
第一节 橄榄石	145
一、橄榄石成分的测定	145
二、橄榄石晶格常数和温度、压力的关系	149
三、球粒陨石中橄榄石含量的测定	150
四、橄榄石的成因和衍射曲线的关系	152
第二节 石榴子石成分的测定及其在岩石学研究中的应用	154
一、石榴子石成分的测定	155
二、金伯利岩及其类似岩石中的石榴子石	158
三、石榴子石的成分是变质程度的标志	160
第三节 其他岛状、环状矿物	162
一、锆石	162
二、黄玉	163
三、红柱石、夕线石和蓝晶石	164
四、斜黝帘石-绿帘石系列	165
五、堇青石	167
六、电气石	169
七、黄长石	169
第十章 在链状硅酸盐研究中的应用	171
第一节 辉石的晶体结构和分类	171
一、辉石的晶体结构和分类	171
二、辉石的分类	173
第二节 单斜辉石的鉴定及其成因岩石学意义	175
一、用两反射鉴定单斜辉石的综合图表	175
二、Ca-Mg-Fe 系列的单斜辉石	178
三、CaMgSi ₂ O ₆ -Mg ₂ Si ₂ O ₆ -CaAl ₂ Si ₂ O ₁₀ 系列的辉石	182
四、碱性辉石系列	185
五、第三个区域 (III) 的辉石	187

六、用小半径相机德拜图鉴定辉石成分	187
第三节 斜方辉石	188
一、斜方辉石的成分鉴定	188
二、斜方辉石成分和温压条件的关系	190
第四节 角闪石	191
一、角闪石的晶体结构和类质同象替代	192
二、某些角闪石系列的鉴定	193
第十一章 在层状硅酸盐研究中的应用	196
第一节 层状硅酸盐的晶体结构及分类	196
一、层状硅酸盐的晶体化学特征	196
二、云母状层状硅酸盐的结构分类	198
第二节 层状硅酸盐X射线粉末图的一般特征	199
一、底面反射和底面间距	199
二、用 d_{001} 区别二八面体和三八面体云母类	201
第三节 在研究云母类矿物时的应用	201
一、云母类矿物的鉴定	201
二、钾质和钠质白云母的底面间距	202
三、云母类矿物的同质多象	203
四、多硅白云母和白云母 b_0 值的意义	205
五、利用底面反射强度的变化测定黑云母中的含铁量	207
第四节 在绿泥石研究中的应用	208
一、绿泥石成分的测定	208
二、七埃绿泥石 (Septechlorite)	211
第五节 蛇纹石变体的鉴定	213
一、蛇纹石的变体	213
二、蛇纹石变体的粉末法鉴定	213
第六节 在研究粘土矿物时的应用	214
一、粘土矿物样品的制备	214
二、粘土矿物的粉末法鉴定	215
三、混合层粘土矿物	216
四、高岭石的结晶程度	219
五、粘土矿物的定量分析	219
第十二章 在架状硅酸盐研究中的应用	222
第一节 架状硅酸盐的晶体化学特征	222
一、概述	222
二、架状硅酸盐的结构分类	223
第二节 长石的某些近代矿物学概念	223
一、斜长石系列和碱性长石系列	223
二、长石的结构特征	224
三、斜长石的结构	227
四、斜长石的定向连生 (intergrowth)	229
五、结构状态 (Structural state)	230

第三节 碱性长石的研究*	230
一、碱性长石成分的测定	230
二、条纹长石的鉴定	232
三、碱性长石有序—无序过程	239
第四节 斜长石的研究*	250
一、斜长石成分鉴定的离子交换法	250
二、用 B 函数和 Γ 函数测定斜长石成分	251
三、用 $\Delta 2\theta_{(131-131)}$ 和 $\Delta 2\theta_{(241-241)}$ 测定斜长石成分	253
四、用 $\Delta 2\theta_{(204-113)}$ 或 $\Delta 2\theta_{(204-400)}$ 测定斜长石成分	253
五、晕长石和环带斜长石成分的鉴定	254
六、斜长石结构状态的测定	254
第五节 长石结构状态研究的地质意义	261
一、概述	261
二、长石的形成温度	261
三、岩石形成深度与长石结构状态的关系	264
四、长石结构状态与形成的地质年代关系	264
五、挥发分对结构状态的影响	264
六、造山运动与长石的结构状态	264
七、冰长石问题	265
第六节 在其他架状硅酸盐研究中的应用	265
一、沸石岩的鉴定	265
二、霞石固溶体的鉴定	266
三、方柱石系列的鉴定	268
四、日光榴石系列的鉴定	268
五、方英石 $d_{(101)}$ 值是地质压力的标志	268
第十三章 在非硅酸盐矿物研究中的应用	270
第一节 碳酸盐类	270
一、概述	270
二、某些碳酸盐系列中类质同象成分的 X 射线粉末法鉴定	272
三、某些岩石中碳酸盐矿物含量的测定	279
第二节 硫化物	284
一、闪锌矿	284
二、磁黄铁矿	289
三、黄铁矿	294
四、毒砂	294
五、黄铜矿	296
六、镍磁黄铁矿等	297
第三节 尖晶石类	299
一、尖晶石类矿物的结构特点	300
二、尖晶石类的化学成分和晶格常数的关系	300
三、铬尖晶石的晶格常数和成分关系及其意义	302
第四节 磷酸盐	306
一、磷灰石	306

二、锂磷铝石	308
第十四章 在工艺岩石学中的应用.....	310
第一节 工艺岩石学中矿物鉴定工作的特点	310
一、工艺岩石学的研究对象	310
二、以复相鉴定为主	310
三、借助相图是主要的方法	310
四、类质同象和同质多象的鉴定和研究	311
五、“现场”快速分析.....	312
第二节 在铸石学及炉渣研究中的应用	312
一、辉绿岩-玄武岩铸石中辉石的鉴定	312
二、铸石制品中橄榄石的鉴定	314
三、铸石中斜长石的鉴定	315
四、确定铬铁矿结晶中心是外加的、还是自生的	316
五、研究炉渣矿物的类质同象	316
六、钙锰辉石—钙蔷薇辉石的相转化	317
第三节 在耐火材料和陶瓷研究中的应用	318
一、工业粉尘中石英的定量分析	318
二、砖块中 SiO_2 变体含量的测定	318
三、高铝制品(高铝砖、高铝陶瓷)中 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的定量分析	318
四、高铝砖和粘土砖质量评定的相分析	319
五、研究陶瓷在烧成过程中物相的变化	320
第四节 在沸石水泥研究中的应用	321
一、沸石水泥和火山灰水泥	321
二、沸石在水泥中的作用	321
三、沸石水泥的机理研究	322
第十五章 X射线粉末法在其他方面的应用.....	323
第一节 晶体结构分析	323
一、晶体结构分析的原理	323
二、简单结构的分析	324
三、从粉末衍射图中获得有用的结构信息	325
四、结构分析	328
第二节 晶体粒度大小的测定	331
一、晶体粒度大小测定的意义	331
二、测量 $10\text{--}100\mu$ (微米)的晶粒大小	331
三、晶体粒度在 1μ 以及 1μ 以下时的测定	331
第三节 X射线岩石组构学	333
一、岩石组构学和X射线岩石组构学	333
二、X射线岩石组构学的一般原理	334
三、由德拜环上的黑斑求晶面择优取向位置	334

附表一 平方形式.....	336
附表二 外推函数 $\frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$	241
附表三 造岩矿物的X射线粉末衍射资料.....	342
参考文献.....	373

第一章 晶体和空间点阵

第一节 晶 体

一、晶态和非晶态

当一种物质内部的原子作有规律的排列时，这种物质就称为晶态物质，反之，则称为非晶态物质。气体和液体是非晶态物质，固体中的玻璃、树胶以及某些塑料也属非晶态物质。几乎所有的矿物都是晶态物质。

二、对称性

晶体的对称性是指它的一部份通过几何操作可以和另一部份完全重合的性质。对称性是晶体的最根本的特性。它不仅表现在晶体的外形上，而且也反映在内部的原子排列上。

三、对称要素

实现晶体对称性的几何操作叫对称要素，包括对称中心、对称面、对称轴和反伸轴等，对称要素的组合形式叫晶体的对称型。所有的晶体有 32 个对称型。

四、晶 系

将 32 个对称型，按对称性由低到高分为七大类，每一大类叫一个晶系：

- 1) 三斜晶系，只有对称中心或连对称中心也没有；
- 2) 单斜晶系，有不超过一个的二次轴或对称面；
- 3) 斜方晶系(正交晶系)，有两个以上二次轴或对称面，但没有高于二次的对称轴；
- 4) 三方晶系，有一个三次对称轴；
- 5) 四方晶系，有一个四次对称轴；
- 6) 六方晶系，有一个六次对称轴；
- 7) 立方晶系(等轴晶系)，有不止一个三次对称轴或四次对称轴存在。

关于结晶学的基本知识，请读者参阅下列教科书：潘兆橹、彭志忠(1957)的《结晶学教程》；弗林特(1954)的《结晶学原理》，季寿元、罗谷风等(1961)的《结晶学》(上、下册)，南京大学矿物教研室(1980)的《结晶学及矿物学教程》等。

第二节 空间格子

一、空间格子的概念

从晶体外部有规律的几何形状出发，很自然导致结晶学家推测晶体内部的结构是有规律排列的。早在十七世纪，惠更斯就用似球状体的有规律的堆积来解释方解石的外部形态、解理和重折射现象。在十八世纪，阿羽依就指出：方解石的解理块总可以无限分下去，并保持晶体的外形不变，直至只包含一个分子大小的小平行六面体，它是晶体结构的不可分割的组成单位。他就是用最小结构单位——平行六面体的观点来解释晶面的整数定律和面角恒等定律的。

后来人们逐渐感觉到，晶体中的分子结构不能用阿羽依的这种毫无间隙的平行六面体的堆砌来表示，因为，晶体的弹性、压缩和热膨胀都难以解释。特别是在原子和分子的理论提出来之后，人们认为，晶体结构中是有空隙的，于是平行六面体的实体结构就逐渐发展为三度空间点阵。这个点阵的结点分布在平行六面体的顶点处，这样的点阵叫做空间格子。

现在，空间格子应该这样来下定义：空间格子是指空间相同的点有规律的，并且是无限量的排列形式，它亦是用来描述晶体内部结构的对称的基本形式（注意不是对称的完整形式，对称的完整形式是空间群）。空间格子本身不是晶体的具体结构，只是晶体上环境对称相同的点在空间上的排列形式，这一点应特别引起注意。许多初学者往往把空间格子和晶格的构造混淆起来，这是不正确的。

空间格子有以下性质：

- 1) 空间格子的结点是无穷排列的，它最近的八个结点组成一个平行六面体，空间格子可以通过这个最小平行六面体的平移来获得。
- 2) 平行六面体可以有不同的选择方法，但其体积是不变的（图 1-1）。
- 3) 任意两个结点可以组成一条行列，在这系列上必有无穷多个结点，但相邻两个结点的距离皆与此两结点间距离相等。
- 4) 任意不在一行列上的三个结点构成一个面网，这个面上必然还有无穷多个结点。

二、晶胞

晶胞是空间格子中能够包含结晶体内部构造完整性的最小平行六面体，晶胞的选择是可以多种多样的。为了使晶胞的选择有一个固定的标准，不会因人而异，有下面几条原则：

- 1) 所选择的平行六面体体积要最小。

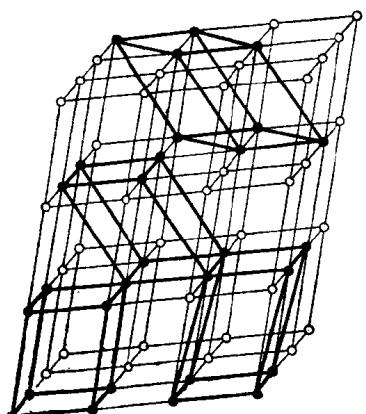


图 1-1 空间格子的最小平行六面体的不同选择

2) 平行六面体棱之间的夹角要尽可能为直角。

3) 平行六面体的棱长要尽可能相等。

有了这三条标准，晶胞的选择往往是固定的，在特殊情况下，为了使晶体化学对比方便，不按上述原则，而是：

4) 选择的晶胞对称性尽可能地高。

三、布拉维空间格子

许多学者对空间格子的类型进行了推导，其中最著名的是布拉维，因而，空间格子又叫布拉维格子。它共有 14 种，分属七个晶系。其中三斜晶系一种，单斜晶系两种，斜方晶系四种，三方晶系一种，四方晶系两种，六方晶系一种，等轴晶系三种(图 1-2)。

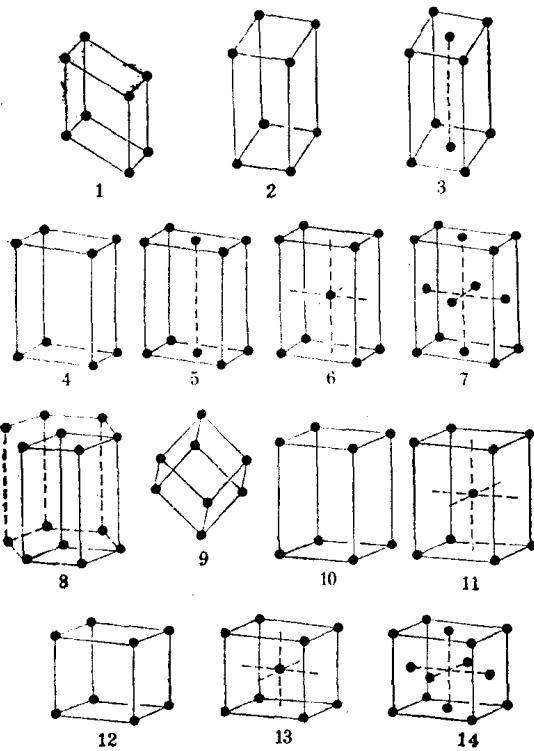


图 1-2 14 种布拉维空间格子

- | | |
|------------|-----------------|
| 1——三斜原始格子； | 8——六方(及三方)原始格子； |
| 2——单斜原始格子； | 9——菱面体格子； |
| 3——单斜底心格子； | 10——四方原始格子； |
| 4——斜方原始格子； | 11——四方体心格子； |
| 5——斜方底心格子； | 12——立方原始格子； |
| 6——斜方体心格子； | 13——立方体心格子； |
| 7——斜方面心格子； | 14——立方面心格子 |

这些空间格子的晶胞参数特征是：

- 1) 三斜格子： $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$ ；
- 2) 单斜格子： $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ ；
- 3) 斜方格子： $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ；

- 4) 四方格子: $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$;
- 5) 六方(及三方)格子: $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$;
- 6) 菱面体格子: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$, $60^\circ, 109^\circ 28' 16''$;
- 7) 立方格子: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

这 14 种空间格子按结点的分布情况又可分为: 原始格子、底心格子(结点除在平行六面体角顶上外, 还分布在一对平面的中心)、体心格子(结点除在顶点外, 还在平行六面体的中心)、面心格子(结点除在顶点外, 还分布在六个面的中心)。

七个晶系中只有斜方晶系四种格子都有。例如, 四方晶系缺底心和面心格子, 显然四方底心格子可以变成体积缩小一半的四方原始格子(图 1-3)。四方面心格子实际上是体小一半的四方体心格子。三斜晶系只有原始格子。但是三斜钠长石的空间格子选的是底心格子(C 心格子), 这是为了使钠长石的结构和单斜透长石的结构便于对比的缘故。

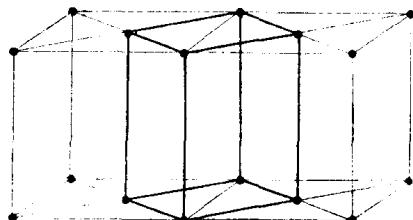


图 1-3 四方底心格子是体积小一半的四方原始格子

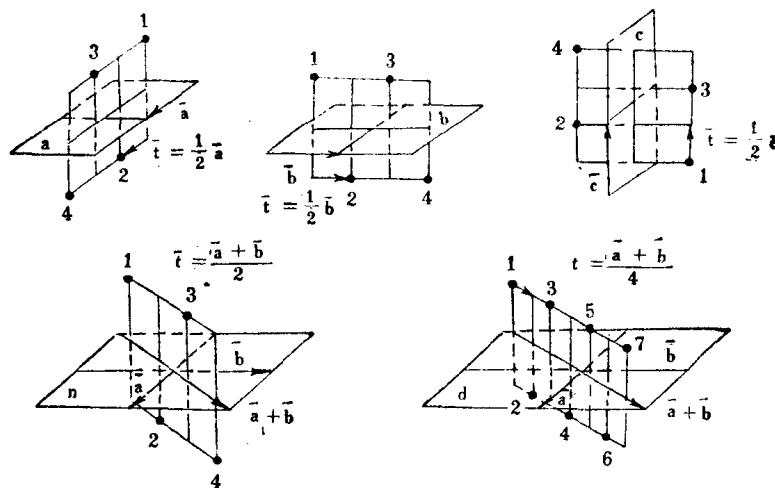


图 1-4 五种滑移对称面

格子中结点数的计算方法是这样的, 凡在格子角顶的结点属八个格子共有, 每个格子只占有 $1/8$ 。同理, 凡在面上的结点, 为两个格子所共有, 每个格子只占有 $1/2$ 。这样很容易算出:

$$\text{原始格子的结点数} = 8 \times \frac{1}{8} = 1,$$

$$\text{底心格子的结点数} = 8 \times \frac{1}{8} + 2 \times \frac{1}{2} = 2,$$

$$\text{体心格子的结点数} = 8 \times \frac{1}{8} + 1 \times 1 = 2,$$

$$\text{面心格子的结点数} = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4.$$

前面已在空间格子中通过任意三个不在一行列的结点都构成一个面网，面上单位面积内的结点数目就称为网面密度. 布拉维研究许多晶体的实际晶面后指出，晶体上实际发育的晶面是网面密度最大的那些晶面. 这就是著名的布拉维法则. 我们在解释矿物的定向连生和晶体的形态时，常常要涉及到网面密度和布拉维法则.

在粉末法中，最常接触到的，也是最重要的概念是面网间距. 所谓面网间距，就是同一组(hkl)的面网中最近的两个平行的面网之间的距离.

四、晶体内部结构的对称要素

讲到晶体内部结构的对称操作时，除晶体形态的对称要素——镜面反映、旋转、反伸、旋转反映和旋转反伸5种以外，还有下列对称要素：

1) 平移，即空间格子，它可以通过十四次布拉维格子的平移来实现三度空间内的无限重复.

2) 滑移对称面，它与镜面对称面不同在于一个图形经反映后还要平行一个固定的距

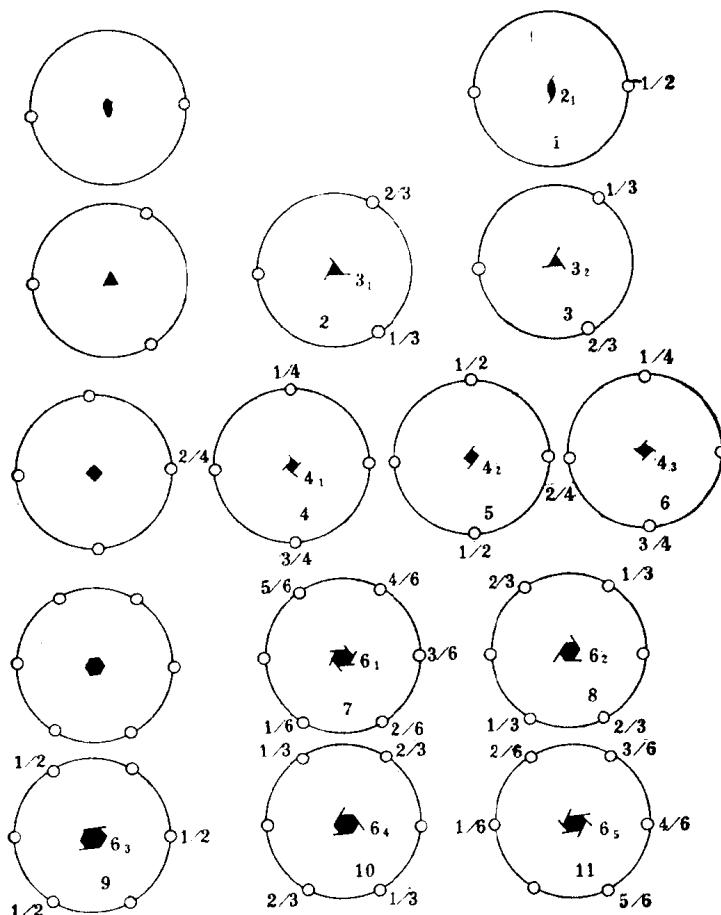


图 1-5 11 种螺旋对称轴