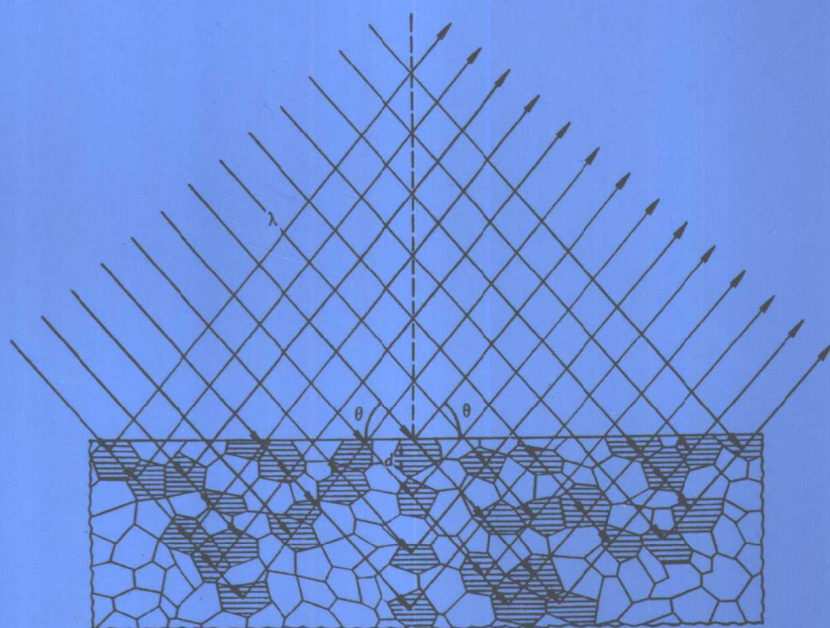


X射线地力学

安欧著



地震出版社

地震科学联合基金资助出版

X 射线地力学

安 欧 著

地 震 出 版 社

2001

图书在版编目 (CIP) 数据

X 射线地力学 / 安欧 著. —北京: 地震出版社,
2001.6

ISBN 7-5028-1905-3

I. X… II. 安… III. 构造地应力—X 射线衍射分
析 IV. P553

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2001) 第 029427 号

内 容 提 要

全书总结了 X 射线在地壳力学研究中的应用, 包括 X 射线晶体学和物理学; 岩石矿相和组构测定; 岩矿力学性质和均质度测量; 岩矿弹性和塑性形变测量; 岩体古构造、残余和现今应力测量; 结构面、构造体系和运动次序鉴定; 震源力学、古地震和未来地震危险区划; 构造应力场和活断层对岩体工程的作用; 残余与现今叠加应力场和岩体裂缝网在油气勘探开发中的应用。

本书可供地质、地震、石油、煤炭、水电、铁道、地球物理和工程力学等领域的科研、教学、勘测、设计人员和研究生及高等学校学生参考。

X 射线地力学

安欧 著

责任编辑: 张晓波

特邀编辑: 史 明

出版发行: 地 震 出 版 社

北京民族学院南路 9 号

邮编: 100081

发行部: 68423031 68467993

传真: 68423031

门市部: 68467991

传真: 68467972

总编室: 68462709 68423029

传真: 68467972

E-mail: seis@ht.rol.cn.Net

经销: 全国各地新华书店

印刷: 北京地大彩印厂

版 (印) 次: 2001 年 6 月第一版 2001 年 6 月第一次印刷

开本: 787×1092 1/16

字数: 519 千字

印张: 20.25

印数: 001~500

书号: ISBN 7-5028-1905-3 / P·1082 (2454)

定价: 68.00 元

版权所有, 翻印必究

(图书出现印装问题, 本社负责调换)

序 言

本世纪，地球科学已步入综合研究的时代，学科的综合、汇流、交叉、渗透、结合及边缘学科随之而生。天文地质把天文学、大气物理学与地质学自然地结合起来。地质力学把理论力学与大地构造学结合起来。这种从分到合的趋势，是历史发展的必然过程。这是因为：地学本身具有综合性。分学科不是由于事物的本质，而是由于人类在科学研究历史过程中认识能力的局限性。综合是人类对自然规律的认识在新高度上的更加逼近；人类对自然的认识已从个体迈入系统。系统思维的对象是整体，而不是个体要素，从一孔之见进入整体分析就要综合，这是自然科学向更高层次发展的必然趋势；在自然科学发展的初级阶段，把本来综合的系统分立开来进行分门研究，对各学科的发展起到了历史的推动作用，累积了丰富的成果，使各学科逐步形成了各自的学科体系。但到了各学科都有一定的积累后仍维持这种分离状态，就会阻碍认识的深化，互有关联资料的分离会使认识产生片面性，甚至误入歧途。一个系统，必须放在更大的系统中来进行再认识，才能看清全貌和与外界的相互关系。一个学科，也必须放在更大的综合学科范围内进行再研究，才能找到其间固有的多枝多节的本来脉络，使之有所深入，有所扩展，有所前进。因为，自然科学按各自的学科体系发展至今，综合就是创造。用单一学科知识，已不能认识由各有关学科来共同反映的规律和复杂的现象了。

物理学与地学的结合，是地球科学发展的必然结果。至今，已形成了地球物理学、构造物理学、地质力学、地球动力学等学科。X 射线是波长介于紫外线与 γ 射线之间的波长较短的电磁波。电磁波，是地学研究中的一个重要方法。地震学使用的许多方法都是来自电磁波研究和以此为基础发展起来的。断裂带活动和大地震前的电磁波反映，已逐步形成地球电磁波理论。X 射线物理学，已渗透到许多近代学科中去，获得了广泛的应用。X 射线在晶体学中的应用已发展为“X 射线晶体学”，在医学中的应用已发展为“X 射线诊断学”，在金属学中的应用已发展为“X 射线金属学”，现将其在地壳力学研究中的应用总结为“X 射线地力学”。这也是 X 射线学和地学发展的必然结果，自从劳埃 1912 年

发现晶体衍射 X 射线时起，就是用 X 射线来测定矿物晶体结构的，至今已有 80 余年的历史了。

X 射线地力学，是用 X 射线研究岩矿的力学性质和结构、地壳运动和动力、地震活动和区划、岩体工程和应用、油气勘探和开发等方面的学科。用 X 射线来研究固体地壳有许多优点：

1. 可研究地壳宏观现象的小至 10^{-8} cm 量级的微观物理机制，从物理本质上深入研究这些现象的精细结构和过程细节；

2. 当地壳的宏观现象显示不清楚、不充分、不确定时，可从微观上观察、鉴定和测量；

3. 当地壳现象在宏观上只能给出定性显示时，常可给出定量的结果，若多点测量则可得到场的资料。

这就是用微观的方法，研究宏观的现象。

从宏观进入微观领域，这是地球科学发展的必然进程。在地壳研究中，当问题的数学解似乎严格但在物理上并不正确时，当宏观概念已经广为应用但在物理上并不严格时，当现象十分相似但却有不同的成因而多解时，都力求把解决问题的希望指向物理本质的研究。因为现象宏观上无序，微观上却常常是有序的。宏观上的时空有序结构，也是微观作用的结果。

科学的理论和方法，对实践有指导和应用价值。但正确的思维推论是要根据可靠的现象观测。在地球科学中，现场实测和鉴定是进一步深入研究的基础。有了这些可靠的基础，才能从生动的直观现象和测量结果进展到正确的抽象思维，并正确地返回到实践中去，以深入地了解过去，解释现在，预测未来。而用物理方法从微观上对地壳宏观现象进行观察、测量和鉴定，是获取可靠的实际资料和深入研究其物理本质与过程细节的重要途径。

望《X 射线地力学》这本书，能推动这一重要学科领域的开拓和进展，让它在生产中发挥更大的作用。

安 欧

1993 年 6 月 于北京



作者简介

安欧，1932年生，辽宁辽阳人，1956年毕业于北京师范大学物理系，继在中国科学院物理所和地质所进修研究 X 射线物理学、晶体范性学、光性矿物学和新构造学。历任地质力学所物理室负责人、所务委员，国家地震局学术评议小组成员、技术职称评委会委员、学术委员会地震地质组成员，地壳应力所高级职称评委会、学位评定委员会和学术委员会委员、研究生导师、室主任、研究员，《地质力学丛刊》、《华北地震科学》和《地壳构造与地壳应力文集》编委，地震科学联合基金会地震学评审组成员，中国地震学会理事，美国传记研究院顾问委员会委员和协会理事、英国国际传记中心国际研究员和副理事长。

主要研究地壳动力学，包括地应力测量、岩石力学、岩石热学、岩石磁学、岩石蠕变、构造力学、天文地质、成矿规律、X 射线、光弹性、超声波实验和构造应力场理论及其在矿产勘查、岩体工程和地震预测中的应用。出版了系统专著《构造应力场》、《潜山油藏》、《地壳动力学》，编译了《复杂构造带和多期变形区油气勘探》。享受政府特殊津贴。被美国传记研究院选入《世界500名人录》、《世界世纪知识名人收藏馆》，被英国国际传记中心选入《优等500名人——新一代》、《20世纪世界2000名杰出学者》。

目 录

第一章 X 射线晶体学	(1)
第一节 晶体结构	(1)
一、结构表示	(1)
二、轴面关系	(5)
三、结构类型	(7)
第二节 晶体性质	(14)
一、弹性变形机制	(15)
二、滞弹性变形机制	(24)
三、塑性变形机制	(26)
四、断裂机制	(26)
第二章 X 射线物理学	(29)
第一节 X 射线本质	(29)
一、电磁波	(29)
二、X 射线	(30)
第二节 X 射线发生	(30)
一、X 射线管	(30)
二、X 射线发生机制	(31)
第三节 X 射线性能	(43)
一、透射	(43)
二、散射	(49)
三、衍射	(59)
四、漫射	(82)
五、折射	(87)
六、反射	(89)
第四节 X 射线使用	(89)
一、射线检测	(89)
二、选择波长	(93)
三、净化射线	(94)
四、安全防护	(97)
第三章 衍射线测量	(102)
第一节 德拜法	(102)
一、测量法	(102)
二、衍射相	(105)

三、定指数·····	(111)
第二节 聚焦法·····	(116)
一、测量法·····	(116)
二、衍射相·····	(119)
三、定指数·····	(121)
第三节 计数法·····	(121)
一、测量法·····	(121)
二、衍射图·····	(122)
第四章 岩石矿相分析·····	(123)
第一节 分析原理·····	(123)
第二节 定性分析·····	(124)
第三节 定量分析·····	(125)
第五章 岩石组构测定·····	(130)
第一节 矿物分布测定·····	(130)
一、矿相分布测量·····	(130)
二、矿相分布表示·····	(130)
第二节 晶粒取向测定·····	(130)
一、晶体取向表示·····	(130)
二、多晶取向测定·····	(132)
第六章 岩矿性质测定·····	(136)
第一节 力学性质测定·····	(136)
一、岩矿力学性质机制·····	(136)
二、岩矿力学性质测量·····	(137)
第二节 均质程度测定·····	(141)
一、检测原理·····	(141)
二、检测方法·····	(144)
第七章 岩矿形变测量·····	(147)
第一节 弹性形变测量·····	(147)
一、宏观弹性形变测量·····	(147)
二、微观弹性形变测量·····	(147)
第二节 塑性形变测量·····	(150)
一、滑移测量·····	(151)
二、孪生测量·····	(153)
三、晶裂测量·····	(155)
四、再结晶测定·····	(157)
第八章 岩体应力测量·····	(158)
第一节 古构造应力测定·····	(158)
一、岩石后生组构测定法·····	(158)
二、岩矿塑性变形测定法·····	(165)

第二节 古构造残余应力测量	(166)
一、古构造残余应力场分类	(166)
二、古构造残余应力场性质	(167)
三、古构造残余应力场机制	(171)
四、古构造残余应力场特征	(181)
五、古构造残余应力场测量	(182)
第三节 现今构造应力测量	(192)
一、X射线法的特点	(192)
二、全应力状态测量	(193)
第九章 构造力学研究	(201)
第一节 结构面鉴定	(201)
一、残余应力法	(201)
二、岩石组构法	(201)
三、岩石成分法	(202)
四、塑性形变法	(203)
第二节 构造带鉴定	(203)
一、残余应力法	(203)
二、岩石组构法	(205)
第三节 构造体系鉴定	(206)
一、残余应力法	(206)
二、岩石组构法	(207)
第四节 运动次序鉴定	(207)
一、鉴定依据	(207)
二、鉴定方法	(207)
三、鉴定特点	(209)
第十章 地震活动研究	(210)
第一节 震源力学	(210)
一、震源破裂应力	(210)
二、震源释放能量	(243)
三、震源发震机制	(255)
第二节 古地震区划	(259)
一、古地震区划能量差法	(259)
二、红河测区古地震区划	(260)
第三节 地震危险区划	(263)
一、应力场叠加法地震危险区划	(263)
二、鲜水河测区地震危险区划	(264)
三、红河测区地震危险区划	(269)
四、安宁河测区地震危险区划	(272)
第十一章 岩体工程应用	(277)

第一节 构造应力场·····	(277)
一、对工程的准静态影响·····	(277)
二、对工程的动态影响·····	(278)
第二节 活动断层·····	(280)
一、活动断层测量·····	(280)
二、断层对工程影响·····	(280)
第十二章 油气勘探开发·····	(283)
第一节 油田应力场概述·····	(283)
一、油田应力场的种类·····	(283)
二、油田应力场的特点·····	(283)
第二节 油田应力场测算·····	(284)
一、全向残余应力测量·····	(284)
二、残余现今二场叠加·····	(289)
三、油田应力场的监测·····	(291)
第三节 应力场与油藏形成·····	(292)
一、油气生成·····	(292)
二、油气运移·····	(293)
三、油气储聚·····	(296)
第四节 应力场与油气勘探·····	(297)
一、有利应力区划·····	(297)
二、有利裂缝区划·····	(297)
三、高产油区预测·····	(301)
第五节 应力场与油田开发·····	(302)
一、注采井网布局·····	(302)
二、低渗油田开发·····	(308)
三、钻井稳定研究·····	(311)

第一章 X 射线晶体学

第一节 晶体结构

一、结构表示

1. 空间点阵

晶体中的质点在三维空间的周期性规则排列构成的三维空间网络，为空间点阵。质点在点阵中所在位置，为阵点。过阵点连成的直线，为晶轴。阵点在三维空间周期排列而构成的各平行等距晶轴族，为晶轴系。一组阵点所在的平面，为晶面。阵点在三维空间周期排列而构成的各平行等距晶面族，为晶面系。在三维晶轴方向周期排列的阵点组成的沿三轴方向相依重复出现的最小三维体素，为晶胞。晶胞沿三轴的无数次等距平移，便构成整个空间点阵。因此，晶胞是构成空间点阵的基元单位。

晶体空间点阵的阵点分布，可用三维周期函数表示。取晶胞中一顶点为原点，过原点三个棱所在三晶轴上各阵点的周期长度为 a 、 b 、 c ，则矢量 a 、 b 、 c 便规定了晶胞的大小和形状，为一个平行六面体。故取 a 、 b 、 c 所在晶轴为坐标轴，晶胞的面角 $\alpha = \angle bc$ ， $\beta = \angle ca$ ， $\gamma = \angle ab$ 。由于整个晶体点阵可由这三个阵点排列的周期长度 a 、 b 、 c 按一定的棱面角经过无数次地等距平移构成，故称 a 、 b 、 c 、 α 、 β 、 γ 为点阵参数。 a 、 b 、 c 为点阵矢量。

点阵中一阵点的径矢

$$\mathbf{r}_{\langle mnp \rangle} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c} \quad (1.1.1)$$

m 、 n 、 p 是无公约数的整数，表示阵点位置，为阵点指标或指数。一阵点的指标，表示为 $\langle m n p \rangle$ 。则在三坐标轴上与原点最近的第一个阵点的径矢，为

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r}_{\langle 100 \rangle} &= \mathbf{a} \\ \mathbf{r}_{\langle 010 \rangle} &= \mathbf{b} \\ \mathbf{r}_{\langle 001 \rangle} &= \mathbf{c} \end{aligned} \right\}$$

晶轴系，用其中过原点一条轴上的第一个阵点的指标 m 、 n 、 p 表示。这第一个阵点与原点距离的矢量和数量

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r}_{\{mnp\}} &= m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c} \\ r_{\{mnp\}} &= \sqrt{m^2 a^2 + n^2 b^2 + p^2 c^2 + 2mnab\cos\gamma + 2npbcc\cos\alpha + 2pmcac\cos\beta} \end{aligned} \right\} \quad (1.1.2)$$

此晶轴的指标或指数，表示成 $[mnp]$ 。若晶轴与一坐标轴平行，则其上第一个阵点的径矢分量取为 1，相应的晶轴指标亦为 1，而在另二坐标轴上的径矢量为零，于是相应的另二晶轴指标亦为零。于是，得

$$\left. \begin{aligned} r_{[100]} &= a \\ r_{[010]} &= b \\ r_{[001]} &= c \end{aligned} \right\}$$

若晶轴与一坐标面平行，因其在另一坐标轴上的径矢分量为零，则相应的另一晶轴指标亦为零。因此，平行坐标轴向 a 、 b 、 c 的晶轴指标为 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 。平行坐标面 (ab) 、 (bc) 、 (ca) 的晶轴指标为 $[110]$ 、 $[011]$ 、 $[101]$ 。

晶面系用其中与原点最近一个面在三个坐标轴上截距 $\frac{a}{h}$ 、 $\frac{b}{k}$ 、 $\frac{c}{l}$ 的无公约整数分母 h 、 k 、 l 表示。于是晶面系的指标或指数，表示成 (hkl) 。若截距为负，则在相应的指标上加负号。 $\frac{1}{h}:\frac{1}{k}:\frac{1}{l}=m:n:p$ ，也是三个无公约数的整数。若晶面系与某一坐标轴平行，则其在此轴上的截距为无限大，因而相应的指标为零。若晶面系与某一坐标面平行，因在此面上二坐标轴上截距为无限大，故相应的二指标皆为零，而在另一坐标轴上截距为 1。因此，晶面 (001) 、 (100) 、 (010) ，即晶胞的 (ab) 、 (bc) 、 (ca) 面。与原点最近一个晶面到原点的距离，即此晶面系的晶面间距 $d_{(hkl)}$ 。由于晶面在三个坐标轴上的截距 $\frac{a}{h}$ 、 $\frac{b}{k}$ 、 $\frac{c}{l}$ ，把 a 、 b 、 c 分成 h 、 k 、 l 等分，故晶面指数越小，则晶面间距越大。坐标面晶面系 (100) 、 (010) 、 (001) 的面间距 $d_{(100)}$ 、 $d_{(010)}$ 、 $d_{(001)}$ 最大，当坐标面角为直角时，它们依次等于 a 、 b 、 c 。若晶体单位体积中的阵点数一定，则晶面间距越大，其上的阵点越密。这种晶面常是天然晶体的结晶表面、节理面或滑移面。

2. 倒易点阵

晶体点阵的坐标常为斜坐标系。表示其中的晶面系和 X 射线在其中的衍射，用倒易点阵较为简便。倒易点阵的点阵矢量 a^* 、 b^* 、 c^* ，称为倒易矢量，其大小为倒易点阵参数 a^* 、 b^* 、 c^* 。为区别起见，将原空间点阵称为正点阵。 a^* 垂直正点阵的 (bc) 面， b^* 垂直正点阵的 (ca) 面， c^* 垂直正点阵的 (ab) 面。因而有

$$\left. \begin{aligned} a \cdot b^* &= a \cdot c^* = b \cdot a^* = b \cdot c^* = c \cdot a^* = c \cdot b^* = 0 \\ a \cdot a^* &= b \cdot b^* = c \cdot c^* = 1 \end{aligned} \right\} \quad (1.1.3)$$

可见，倒易点阵是一个几何上的虚点阵。故在正点阵的晶胞面角为直角时，正点阵的点阵矢量与相应的倒易矢量平行。正点阵的晶胞体积为：

$$V = a \cdot (b \times c) = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma} \quad (1.1.4)$$

则由式(1.1.3)得(图 1.1.1)

$$\left. \begin{aligned} a^* &= \frac{1}{a \cos \angle aa^*} = \frac{|b \times c|}{V} = \frac{bc \sin \alpha}{V} = \frac{1}{d_{(100)}} \\ b^* &= \frac{1}{b \cos \angle bb^*} = \frac{|c \times a|}{V} = \frac{ca \sin \beta}{V} = \frac{1}{d_{(010)}} \\ c^* &= \frac{1}{c \cos \angle cc^*} = \frac{|a \times b|}{V} = \frac{ab \sin \gamma}{V} = \frac{1}{d_{(001)}} \end{aligned} \right\} \quad (1.1.5)$$

故在正点阵晶胞面角为直角时,

$$\left. \begin{aligned} a^* &= \frac{1}{a} \\ b^* &= \frac{1}{b} \\ c^* &= \frac{1}{c} \end{aligned} \right\}$$

又由于 a^* 与 $b \times c$ 同向, b^* 与 $c \times a$ 同向, c^* 与 $a \times b$ 同向, 则其有矢量形式

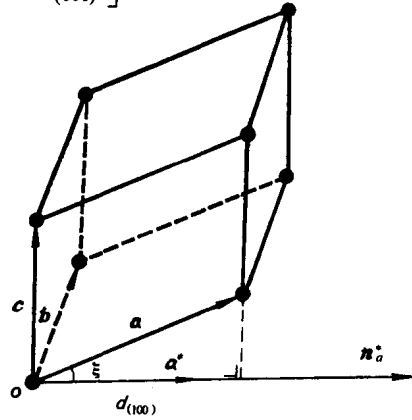


图 1.1.1 倒易点阵参数的转化表示

$$\left. \begin{aligned} a^* &= \frac{b \times c}{V} \\ b^* &= \frac{c \times a}{V} \\ c^* &= \frac{a \times b}{V} \end{aligned} \right\} \quad (1.1.6)$$

而倒易矢量夹角的余弦

$$\cos \alpha^* = \frac{b^* \cdot c^*}{b^* c^*} = \frac{\frac{c \times a}{V} \cdot \frac{a \times b}{V}}{\frac{|c \times a|}{V} \frac{|a \times b|}{V}} = \frac{(c \cdot a) \cdot (a \cdot b) - (c \cdot b) \cdot (a \cdot a)}{ca \sin \beta \cdot ab \sin \gamma} = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}$$

同理得

$$\left. \begin{aligned} \cos \beta^* &= \frac{\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta}{\sin \gamma \sin \alpha} \\ \cos \gamma^* &= \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta} \end{aligned} \right\} \quad (1.1.7)$$

倒易点阵的晶胞体积

$$V^* = \mathbf{a}^* \cdot (\mathbf{b}^* \times \mathbf{c}^*) = \frac{b \times c}{V} \left(\frac{c \times a}{V} \times \frac{a \times b}{V} \right) = \frac{(b \times c) \cdot [(c \times a) \times (a \times b)]}{V^3} = \frac{1}{V} \quad (1.1.8)$$

晶面 (hkl) 的法线 $\mathbf{n}_{(hkl)}$ 垂直面上矢量 $\frac{b}{k} \frac{a}{h}$ 和 $\frac{c}{l} \frac{b}{k}$ (图 1.1.2), 则 $\mathbf{n}_{(hkl)}$ 同向于矢性积

$$\left(\frac{b}{k} \frac{a}{h} \right) \times \left(\frac{c}{l} \frac{b}{k} \right) = \frac{b \times c}{kl} + \frac{c \times a}{lh} + \frac{a \times b}{hk}$$

用 $\frac{hkl}{V}$ 乘上式左右, 得平行于 $\mathbf{n}_{(hkl)}$ 的矢量

$$\mathbf{d}^*_{(hkl)} = h\mathbf{a}^* + kb^* + lc^*$$

其大小

$$\begin{aligned} d^*_{(hkl)} &= \sqrt{h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2(hka^*b^* \cos\gamma^* + klb^*c^* \cos\alpha^* + lhc^*a^* \cos\beta^*)} \\ &= \frac{1}{V} \sqrt{h^2 b^2 c^2 \sin^2 \alpha + k^2 c^2 a^2 \sin^2 \beta + l^2 a^2 b^2 \sin^2 \gamma + 2[hkabc^2 (\cos\alpha \cos\beta - \cos\gamma) \\ &\quad + kla^2 bc (\cos\beta \cos\gamma - \cos\alpha) + lhab^2 c (\cos\gamma \cos\alpha - \cos\beta)]} \end{aligned} \quad (1.1.9)$$

对坐标面晶面系(100)有

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{d}^*_{(100)} &= \mathbf{a}^* \\ \text{对坐标面晶面系(010)有} \\ \mathbf{d}^*_{(010)} &= \mathbf{b}^* \\ \text{对坐标面晶面系(001)有} \\ \mathbf{d}^*_{(001)} &= \mathbf{c}^* \end{aligned} \right\} \quad (1.1.10)$$

\mathbf{d}^* 称为晶面系 (hkl) 的倒易矢量, 决定此晶面系法线的空间取向。若晶面 (hkl) 过原点, 则其上阵点的径矢 $\mathbf{r}_{\langle mnp \rangle}$ 与此晶面法向

单位矢量 $\frac{\mathbf{d}^*_{(hkl)}}{d^*_{(hkl)}}$ 的数性积

$$\mathbf{r}_{\langle mnp \rangle} \cdot \frac{\mathbf{d}^*_{(hkl)}}{d^*_{(hkl)}} = 0$$

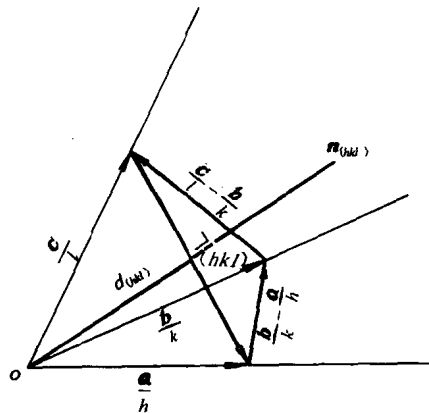


图 1.1.2 晶面 (hkl) 法线与各量关系

将式(1.1.1)和式(1.1.9)代入,并考虑到式(1.1.3),得

$$mh + nk + pl = 0 \quad (1.1.11)$$

若将原点移动 $-\frac{a}{h}$,则阵点 $\langle m n p \rangle$ 的径矢变为

$$\mathbf{r}'_{\langle m n p \rangle} = \left(m + \frac{1}{h}\right)\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c} \quad (1.1.12)$$

则距原点最近的第一个晶面,有

$$\mathbf{r}'_{\langle m n p \rangle} \cdot \frac{\mathbf{d}^*_{(hkl)}}{d^*_{(hkl)}} = d_{(hkl)}$$

将式(1.1.9)和式(1.1.12)代入,得

$$\frac{mh + nk + pl + 1}{d^*_{(hkl)}} = d_{(hkl)}$$

过原点的晶面满足式(1.1.11),则得

$$d^*_{(hkl)} = \frac{1}{d_{(hkl)}} \quad (1.1.13)$$

可见,晶面 (hkl) 的倒易矢量,在此面的法向,等于此晶面系晶面间距的倒数。亦即,晶体点阵中的晶面 (hkl) 可用倒易点阵中一点的径矢 $\mathbf{d}^*_{(hkl)}$ 来表示,此径矢垂直正点阵中晶面 (hkl) 并等于其面间距的倒数。由上式可得

$$\frac{1}{d^2} = d^{*2} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2[hk(\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b}^*) + kl(\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c}^*) + lh(\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a}^*)] \quad (1.1.14)$$

二、轴面关系

1. 晶带定律

与一晶轴 $[m n p]$ 相交的一组晶面系 (hkl) ,为晶带。此晶轴,为晶带轴。因各晶面系 (hkl) 皆与 $[m n p]$ 平行,故各 $\mathbf{d}^*_{(hkl)}$ 皆与 $\mathbf{r}_{[m n p]}$ 垂直,则得

$$\mathbf{r}_{[m n p]} \cdot \mathbf{d}^*_{(hkl)} = 0$$

将式(1.1.2)和式(1.1.9)代入,得

$$mh + nk + pl = 0 \quad (1.1.15)$$

此为晶带定律。

若已知晶带中二晶面 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$ ，因为它们皆满足式(1.1.15)而有

$$\left. \begin{aligned} mh_1 + nk_1 + pl_1 &= 0 \\ mh_2 + nk_2 + pl_2 &= 0 \end{aligned} \right\}$$

则得晶带轴指数

$$\left. \begin{aligned} m &= k_1l_2 - k_2l_1 \\ n &= l_1h_2 - l_2h_1 \\ p &= h_1k_2 - h_2k_1 \end{aligned} \right\} \quad (1.1.16)$$

若已知二晶轴 $[m_1n_1p_1]$ 和 $[m_2n_2p_2]$ 在一晶面上，因为它们皆满足式(1.1.15)而有

$$\left. \begin{aligned} m_1h + n_1k + p_1l &= 0 \\ m_2h + n_2k + p_2l &= 0 \end{aligned} \right\}$$

则得此晶面指数

$$\left. \begin{aligned} h &= n_1p_2 - n_2p_1 \\ k &= p_1m_2 - p_2m_1 \\ l &= m_1n_2 - m_2n_1 \end{aligned} \right\} \quad (1.1.17)$$

2. 轴面夹角

二晶轴 r_1 和 r_2 间夹角 φ 的余弦

$$\cos\varphi = \frac{r_1 \cdot r_2}{r_1 \cdot r_2} \quad (1.1.18)$$

将式(1.1.2)代入，可得 φ 与 m_1 、 n_1 、 p_1 、 m_2 、 n_2 、 p_2 、 a 、 b 、 c 的关系。若已知二晶轴指数和点阵参数，代入上式可求得 φ 。

二晶面 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$ 间夹角 ψ 的余弦

$$\cos\psi = \frac{d_{(h_1k_1l_1)}^* \cdot d_{(h_2k_2l_2)}^*}{d_{(h_1k_1l_1)} \cdot d_{(h_2k_2l_2)}} \quad (1.1.19)$$

将式(1.1.9)代入，可得 ψ 与二晶面指数和点阵参数的关系。若已知二晶面指数和点阵参数，代入上式可求得 ψ 。

晶轴与晶面间夹角 $\theta = 90^\circ - \lambda$ 的正弦

$$\sin\theta = \cos\lambda = \frac{r_{[mnp]} \cdot d_{(hkl)}^*}{r_{[mnp]} \cdot d_{(hkl)}^*} \quad (1.1.20)$$

将式(1.1.2)和式(1.1.9)代入，可得 θ 与晶轴指数、晶面指数和点阵参数的关系。若已知这些指数和参数，代入上式可求得 θ 。若 $\theta = 90^\circ$ ，则 $\lambda = 0^\circ$ ，上式等于1，这说明此时晶轴 $r_{[mnp]}$

与晶面(hkl)的倒易矢量 $d_{(hkl)}^*$ 平行。将式(1.1.2)和式(1.1.9)代入此条件下的关系式(1.1.20), 得

$$1 = \frac{mh + nk + pl}{r_{[mnp]} d_{(hkl)}^*} \quad (1.1.21)$$

此式一般无解。若取点阵参数 $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, 则由式(1.1.2)得

$$r_{[mnp]} = a\sqrt{m^2 + n^2 + p^2}$$

由式(1.1.9)得

$$d_{(hkl)}^* = a^* \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

又由倒易点阵定义, 得

$$a \cdot a^* = 1$$

代入式(1.1.21), 得

$$mh + nk + pl = \sqrt{m^2 + n^2 + p^2} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad (1.1.22)$$

由于

$$m : n : p = \frac{a}{h} : \frac{b}{k} : \frac{c}{l} = a \left(\frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l} \right)$$

a 成为公倍数, 将 $m = h$, $n = k$, $p = l$ 代入式(1.1.22), 此式恒等。可见, 这一对晶轴 $[mnp]$ 和晶面 (mnp) 互相垂直。

三、结构类型

晶体点阵的六个参数之间的大小关系不同, 使晶胞有不同的几何形状。可将它们分成 7 个类型, 晶体也因此而分属于 7 类晶系:

$$\text{正交晶系} \begin{cases} \text{立方晶系: } a = b = c, & \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \\ \text{四方晶系: } a = b \neq c, & \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \\ \text{斜方晶系: } a \neq b \neq c, & \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \end{cases}$$

$$\text{斜交晶系} \begin{cases} \text{单斜晶系: } a \neq b \neq c, & \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta \\ \text{三斜晶系: } a \neq b \neq c, & \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ \end{cases}$$

$$\text{等角晶系} \begin{cases} \text{三角晶系: } a = b = c, & \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ \\ \text{六角晶系: } a = b \neq c, & \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ \end{cases}$$