

晶体对称性与空间群表

表 3.1. 七个晶系

三斜 triclinic	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$
单斜 monoclinic	$a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$
正交 orthorhombic	$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
四方 tetragonal	$a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
六方 hexagonal	$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
三方 trigonal	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
立方 cubic	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

注释：表中“ \neq ”仅指不需要等于。

表 3.2. 七个晶系的特征对称元素

晶系	特征对称元素
三斜	无
单斜	一个二次对称轴或对称面
正交	三个互相垂直的二次对称轴或两个互相垂直的对称面
四方	有一个四次对称轴
六方	有一个六次对称轴
三方	有一个三次对称轴
立方	四个立方体对角线上有三次轴

注：对称轴包括旋转、螺旋轴；对称面包括镜面和滑移面。

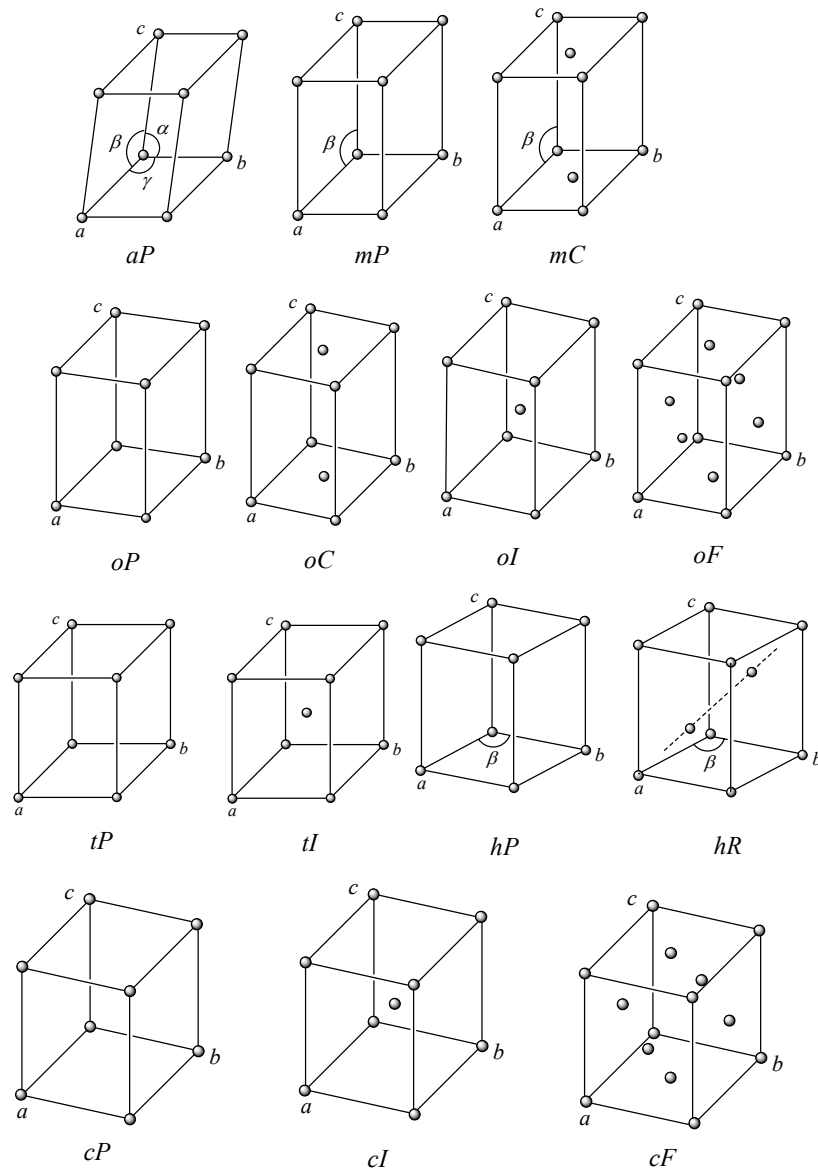


图 3.5. 14 种 Bravais 晶格。 aP = 三斜 (triclinic), mP = 简单单斜 (monoclinic primitive), mC = 底心单斜 (monoclinic C-centered), oP = 简单正交 (orthorhombic primitive), oC = C 底心正交 (orthorhombic C-centered, 取轴方法不同, 可以相当于 A 心底), oI = 体心正交 (orthorhombic body-centered), oF = 面心正交 (orthorhombic face-centered), tP = 简单四方 (tetragonal primitive), tI = 体心四方 (tetragonal body-centered), hP = 简单三方或六方 (trigonal or hexagonal primitive), hR = 菱面体、按六方取晶胞 (Rhombohedral hexagonal setting), cP = 简单立方 (cubic primitive), cI = 体心立方 (cubic body-centered), cF = 面心立方 (cubic face-centered)。

表 3.3. 重要对称元素的书写与图形记号

对称元素类型	书写记号	图示记号	
		垂直于纸面	在纸面内
平移向量	a, b, c		
倒反中心	$\bar{1}$	○	○
旋转轴	2		→
	3		
	4		
	6		
螺旋轴	2_1		
	$3_1, 3_2$		
	$4_1, 4_2, 4_3$		
	$6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$		
反轴	$\bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$		
镜面	m	—	
滑移面	a, b, c	在纸面内滑移 --- 离开纸面滑移	
	n	-.-.-.-.	
	d	-.-.-.-.	

表 3.4. 32 个点群和 230 个空间群

晶系	点群	空间群编号	空间群记号	备注	晶系	点群	空间群编号	空间群记号	备注		
三斜	1	1	$P1$	手性	正交	mmm	50	$Pban$	中心		
	$\bar{1}$	2	$P\bar{1}$	中心			51	$Pmma$	中心		
单斜	2	3	$P2$	手性			52	$Pnna$	中心*		
		4	$P2_1$	手性			53	$Pmna$	中心		
		5	$C2$	手性			54	$Pcca$	中心*		
		6	Pm	非心			55	$Pbam$	中心		
		7	Pc	非心			56	$Pccn$	中心*		
	m	8	Cm	非心			57	$Pbcm$	中心		
		9	Cc	非心			58	$Pnmm$	中心		
		10	$P2/m$	中心			59	$Pmmn$	中心		
		11	$P2_1/m$	中心			60	$Pbcn$	中心*		
		12	$C2/m$	中心			61	$Pbca$	中心*		
		13	$P2/c$	中心			62	$Pnma$	中心		
		14	$P2_1/c$	中心*			63	$Cmcm$	中心		
		15	$C2/c$	中心			64	$Cmca$	中心		
正交	222	16	$P222$	手性	65	$Cmmm$	中心				
		17	$P222_1$	手性*	66	$Cccm$	中心				
		18	$P2_12_12$	手性*	67	$Cmma$	中心				
		19	$P2_12_12_1$	手性*	68	$Ccca$	中心*				
		20	$C222_1$	手性*	69	$Fmmm$	中心				
		21	$C222$	手性	70	$Fddd$	中心*				
		22	$F222$	手性	71	$Immm$	中心				
		23	$I222$	手性	72	$Ibam$	中心				
		24	$I2_12_12_1$	手性	73	$Ibca$	中心				
		25	$Pmm2$	非心	74	$Imma$	中心				
		$mm2$	26	$Pmc2_1$	非心	4	75	$P4$	手性		
			27	$Pcc2$	非心		76	$P4_1$	手性*		
			28	$Pma2$	非心		77	$P4_2$	手性		
			29	$Pca2_1$	非心		78	$P4_3$	手性*		
	30		$Pnc2$	非心	79		$I4$	手性			
	31		$Pmn2_1$	非心	80		$I4_1$	手性*			
	32		$Pba2$	非心	$\bar{4}$		81	$P\bar{4}$	非心		
	33		$Pna2_1$	非心			82	$I\bar{4}$	非心		
	34		$Pnn2$	非心			4/m	83	$P4/m$	中心	
	35		$Cmm2$	非心				84	$P4_2/m$	中心	
	36		$Cmc2_1$	非心	85			$P4/n$	中心*		
	37		$Ccc2$	非心	86			$P4_2/n$	中心*		
	38		$Amm2$	非心	87			$I4/m$	中心		
	39		$Abm2$	非心	88			$I4_1/a$	中心*		
	40		$Ama2$	非心	422	89		$P422$	手性		
	41		$Aba2$	非心		90		$P4_22$	手性*		
	42		$Fmm2$	非心		91	$P4_122$	手性			
	43		$Fdd2$	非心*		92	$P4_12_12$	手性*			
	44		$Imm2$	非心		93	$P4_222$	手性*			
	45		$Iba2$	非心		94	$P4_22_12$	手性*			
	46		$Ima2$	非心		95	$P4_322$	手性*			
	47		$Pmmm$	中心		96	$P4_32_12$	手性*			
	48		$Pnnn$	中心		97	$I422$	手性			
	49		$Pccm$	中心		98	$I4_122$	手性*			
	四方		4	75	$P4$	手性	4/m	83	$P4/m$	中心	
				76	$P4_1$	手性*		84	$P4_2/m$	中心	
				77	$P4_2$	手性		85	$P4/n$	中心*	
				78	$P4_3$	手性*		86	$P4_2/n$	中心*	
		79		$I4$	手性	87		$I4/m$	中心		
		80		$I4_1$	手性*	88		$I4_1/a$	中心*		
		$\bar{4}$		81	$P\bar{4}$	非心		422	89	$P422$	手性
				82	$I\bar{4}$	非心			90	$P4_22$	手性*
		422	83	$P4/m$	中心	91	$P4_122$		手性		
			84	$P4_2/m$	中心	92	$P4_12_12$		手性*		
	85		$P4/n$	中心*	93	$P4_222$	手性*				
	86		$P4_2/n$	中心*	94	$P4_22_12$	手性*				
	87		$I4/m$	中心	95	$P4_322$	手性*				
	88		$I4_1/a$	中心*	96	$P4_32_12$	手性*				
	89		$P422$	手性	97	$I422$	手性				
90	$P4_22$		手性*	98	$I4_122$	手性*					
91	$P4_122$		手性								
92	$P4_12_12$		手性*								
93	$P4_222$	手性*									
94	$P4_22_12$	手性*									
95	$P4_322$	手性*									
96	$P4_32_12$	手性*									
97	$I422$	手性									
98	$I4_122$	手性*									

表 3.4. 32 个点群和 230 个空间群 (续)

晶系	点群	空间群编号	空间群记号	备注	晶系	点群	空间群编号	空间群记号	备注
四方	4mm	99	$P4mm$	非心	三方	32	149	$P312$	手性
		100	$P4bm$	非心			150	$P321$	手性
		101	$P4_2cm$	非心			151	$P3_112$	手性*
		102	$P4_2nm$	非心			152	$P3_121$	手性*
		103	$P4cc$	非心			153	$P3_212$	手性*
		104	$P4nc$	非心			154	$P3_221$	手性*
		105	$P4_2mc$	非心			155	$R32$	手性
		106	$P4_2bc$	非心		156	$P3m1$	非心	
		107	$I4mm$	非心		157	$P31m$	非心	
		108	$I4cm$	非心		158	$P3c1$	非心	
	109	$I4_1md$	非心	159	$P31c$	非心			
	110	$I4_1cd$	非心*	160	$R3m$	非心			
	$\bar{4}2m$	111	$P\bar{4}2m$	非心	161	$R3c$	非心		
		112	$P\bar{4}2c$	非心	162	$P\bar{3}1m$	中心		
		113	$P\bar{4}2_1m$	非心	163	$P\bar{3}1c$	中心		
		114	$P\bar{4}2_1c$	非心*	164	$P\bar{3}m1$	中心		
		115	$P\bar{4}m2$	非心	165	$P\bar{3}c1$	中心		
		116	$P\bar{4}c2$	非心	166	$R\bar{3}m$	中心		
		117	$P\bar{4}b2$	非心	167	$R\bar{3}c$	中心		
		118	$P\bar{4}n2$	非心	168	$P6$	手性		
		119	$I\bar{4}m2$	非心	169	$P6_1$	手性*		
		120	$I\bar{4}c2$	非心	170	$P6_5$	手性*		
	121	$I\bar{4}2m$	非心	171	$P6_2$	手性*			
	122	$I\bar{4}2d$	非心	172	$P6_4$	手性*			
	4/mmm	123	$P4/mmm$	中心	173	$P6_3$	手性		
		124	$P4/mcc$	中心	174	$P\bar{6}$	非心		
		125	$P4/nbm$	中心*	6/m	175	$P6/m$	中心	
		126	$P4/nnc$	中心*		176	$P6_3/m$	中心	
		127	$P4/mbm$	中心	622	177	$P622$	手性	
		128	$P4/mnc$	中心		178	$P6_122$	手性*	
		129	$P4/nmm$	中心*		179	$P6_522$	手性*	
		130	$P4/ncc$	中心*		180	$P6_222$	手性*	
		131	$P4_2/mmc$	中心		181	$P6_422$	手性*	
		132	$P4_2/mcm$	中心	182	$P6_322$	手性*		
		133	$P4_2/nbc$	中心*	6mm	183	$P6mm$	非心	
		134	$P4_2/nnm$	中心*		184	$P6cc$	非心	
		135	$P4_2/mbc$	中心		185	$P6_3cm$	非心	
		136	$P4_2/mnm$	中心	$\bar{6}m$	186	$P6_3mc$	非心	
	137	$P4_2/nnc$	中心*	187		$P\bar{6}m2$	非心		
	138	$P4_2/ncm$	中心*	188		$P\bar{6}c2$	非心		
	139	$I4/mmm$	中心	189		$P\bar{6}2m$	非心		
	140	$I4/mcm$	中心	6/mmm	190	$P\bar{6}2c$	非心		
141	$I4_1/amd$	中心*	191		$P6/mmm$	中心			
142	$I4_1/acd$	中心*	192		$P6/mcc$	中心			
143	$P3$	手性	193		$P6_3/mcm$	中心			
144	$P3_1$	手性	194		$P6_3/mmc$	中心			
三方	3	145	$P3_2$	手性					
		146	$R3$	手性					
		147	$P\bar{3}$	中心					
	$\bar{3}$	148	$R\bar{3}$	中心					

表 3.4. 32 个点群和 230 个空间群 (续二)

晶系	点群	空间群编号	空间群记号	备注	晶系	点群	空间群编号	空间群记号	备注
立方	23	195	$P23$	手性	立方	432	213	$P4_132$	手性*
		196	$F23$	手性			214	$I4_132$	手性
		197	$I23$	手性		$\bar{4}3m$	215	$P\bar{4}3m$	非心
		198	$P2_13$	手性*			216	$F\bar{4}3m$	非心
		199	$I2_13$	手性			217	$I\bar{4}3m$	非心
	$m\bar{3}$	200	$Pm\bar{3}$	中心			218	$P\bar{4}3m$	非心
		201	$Pn\bar{3}$	中心*			219	$F\bar{4}3c$	非心
		202	$Fm\bar{3}$	中心		220	$I\bar{4}3d$	非心*	
		203	$Fd\bar{3}$	中心*		$m\bar{3}m$	221	$Pm\bar{3}m$	中心
		204	$Im\bar{3}$	中心			222	$Pn\bar{3}n$	中心*
		205	$Ia\bar{3}$	中心*			223	$Pm\bar{3}n$	中心
	206	$Pa\bar{3}$	中心*	224			$Pn\bar{3}m$	中心*	
	432	207	$P432$	手性			225	$Fm\bar{3}m$	中心
		208	$P4_232$	手性*			226	$Fm\bar{3}c$	中心
		209	$F432$	手性			227	$Fd\bar{3}m$	中心*
		210	$F4_132$	手性*			228	$Fd\bar{3}c$	中心*
		211	$I432$	手性			229	$Im\bar{3}m$	中心
		212	$P4_332$	手性*			230	$Ia\bar{3}d$	中心*

注：表中手性、非心、中心分别指该空间群属于手性、非中心对称或中心对称空间群。星号表示该空间群可以由系统消光规律唯一确定。

表 3.5. 各晶系空间群国际记号中三个位置代表的方向

晶系	位置所代表的方向		
	1	2	3
三斜 triclinic	—	—	—
单斜 monoclinic	b	—	—
正交 orthorhombic	a	b	c
四方 tetragonal	c	a	(110)
六方 hexagonal	c	a	(210)
三方 trigonal	c	a	(210)
立方 cubic	c	(111)	(110)

表 3.6. 系统消光的条件

衍射指标类型	消光条件	对称元素	备注
hkl	无	P	
	$h+k+l \neq 2n$	I 格子	
	$h+k \neq 2n$	C 格子	
	$k+l \neq 2n$	A 格子	
	$h+l \neq 2n$	B 格子	
	$-h+k+l \neq 3n$	R 格子	三方按六方指标化
	$h-k+l \neq 3n$	R 格子	六方按三方指标化
$0kl$	$k \neq 2n$	$b \perp a$	
	$l \neq 2n$	$c \perp a$	
	$k+l \neq 2n$	$n \perp a$	
	$k+l \neq 4n$	$d \perp a$	仅存在于 F 格子
$h0l$	$h \neq 2n$	$a \perp b$	
	$l \neq 2n$	$c \perp b$	
	$k+l \neq 2n$	$n \perp b$	
	$k+l \neq 4n$	$d \perp b$	仅存在于 F 格子
$hk0$	$h \neq 2n$	$a \perp c$	
	$k \neq 2n$	$b \perp c$	
	$k+l \neq 2n$	$n \perp c$	
	$k+l \neq 4n$	$d \perp c$	
hhl	$l \neq 2n$	$c \perp [110]$	四方、立方
		$c \perp [120]$	三方
	$2h+l \neq 4n$	$d \perp [110]$	四方、立方 I
hhl	$l \neq 2n$	$c \perp a$	三方、六方
$h00$	$h \neq 2n$	$2_1 // a$	
	$h \neq 4n$	$4_1, 4_3 // a$	立方
$0k0$	$k \neq 2n$	$2_1 // b$	
	$h \neq 4n$	$4_1, 4_3 // b$	立方
$00l$	$l \neq 2n$	$2_1, 4_2, 6_3 // c$	
	$l \neq 3n$	$3_1, 3_2, 6_2, 6_4 // c$	三方、六方
	$l \neq 4n$	$4_1, 4_3 // c$	四方、立方
	$l \neq 6n$	$6_1, 6_5 // c$	六方