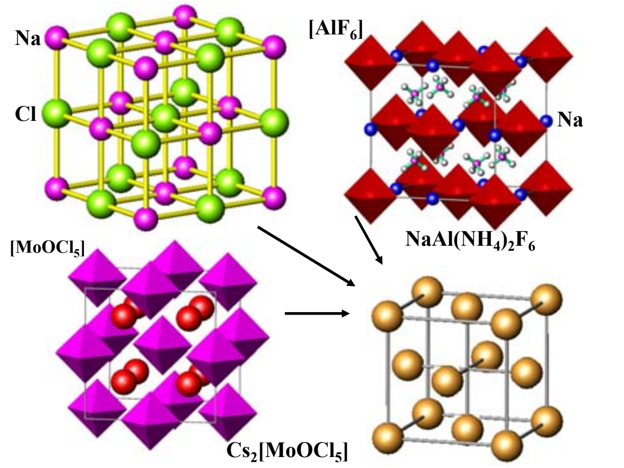
第八章 晶体的内部对称和空间群

厦门大学材料学院宓锦校,jxmi@xmu.edu.cn



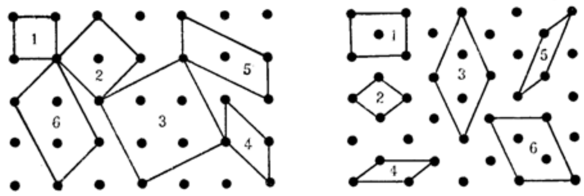
任何晶体的内部质点都是在三维空间呈周期性重复规则排列的,我们可以通过抽象的结点来表述这种空间重复规律,从而形成空间点阵.

空间格子:用抽象的结点来表示晶体内部质点在三维空间呈周期性重复排列规律性的几何图形.它可由一系列不同方向的行列和面网来予以表征,从而把整个空间点阵连接构成格子状。

平行六面体是空间格子中的最小重复单位。整个晶体结构可以看作这种平行六面体在三维空间平行的、毫无间隙的重复堆砌而成。

平行六面体的选择原则如下:

(1)、所选取的平行六面体应能反映结点分布整体所固有的对称性。



(2)、在上述前提下,所选取的平行六面体中的棱与棱之间的直角关系力求最多,或尽可能接近90度。

(3)、在满足以上二个条件的基础上,所选取的平行六面体的体积力求最小。

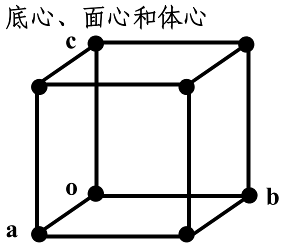
晶胞(cell):在晶体结构中,由实际晶体的内部质点所划分出来的、其形状大小与平行六面体相对应的最小重复单位,称为晶胞。其相应的参数(a、b、c、α、β、γ)称为晶胞参数(cell parameter)或晶格常数。

四种格子类型:原始、底心、面心和体心

(1)、原始格子

(Primitive lattice)

P格子:(0,0,0)+

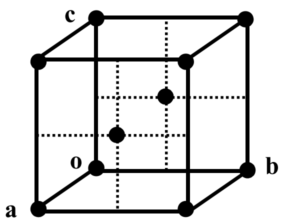


(2)、底心格子

A心格子:

(100)面中心有结点;

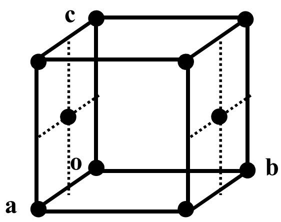
(0,0,0)+; (0,1/2,1/2)+;



B心格子:

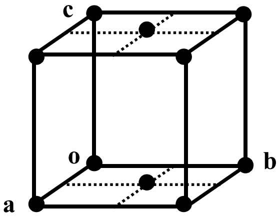
(010)面中心有结点;

(0,0,0)+; (1/2,0,1/2)+;



C心格子：(001)面中心有结点；

(0,0,0)+; (1/2,1/2,0)+;

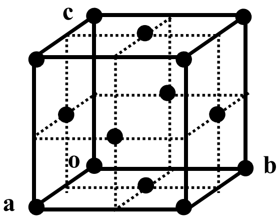


(3)、面心格子(face-centered lattice)

F格子:每个面中心都有结点；

(0,0,0)+; (0,1/2,1/2)+;

(1/2,0,1/2)+; (1/2,1/2,0)+

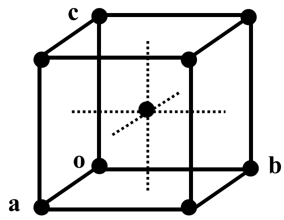


(4)、体心格子(body-centered lattice)

I格子：体中心有结点

(0,0,0)+; (1/2,1/2,1/2)+;

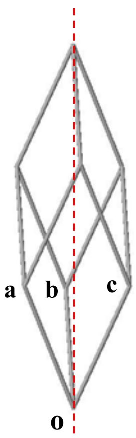
I *body centred (innenzentriert)*



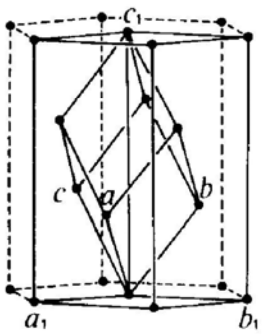
三方R格子: (Rhombohedral lattice)

(0,0,0)+; (2/3,1/3,1/3)+;(1/3,2/3,2/3)+; obverse setting(正定向)

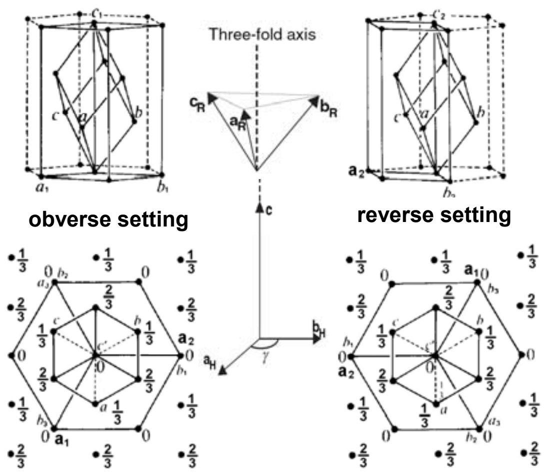
(0,0,0)+; (2/3,1/3,2/3)+;(1/3,2/3,1/3)+; reverse setting(负定向)



菱面体：a=b=c; α=β=γ≠ 90°, 60°, 109°28′16″, 它有一个三次旋转轴，因此，它属于三方晶系。

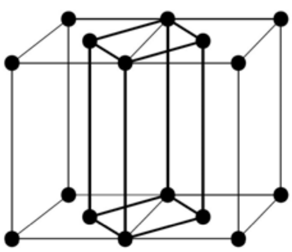


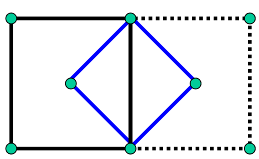
我们通常将这样的菱面体晶胞取成a=b, α=β=90°, γ=120 °这样的晶胞，我们称之为三方晶系六方定向。这时的空间格子称为R格子，其晶胞体积比原来扩大三倍。

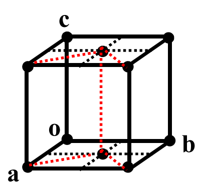


一个晶系最多可以有四种不同的格子类型，晶体中共有7个晶系，但总共只有14种不同的空间格子类型。

原因是：如四方底心格子(C)可以转换为四方原始格子(P)。







14种布拉维格子：

立方晶系：*P, I, F*

四方晶系：*P, I*

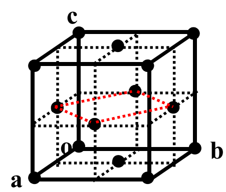
六方晶系：*P*

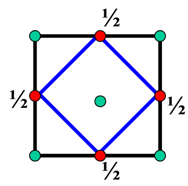
三方晶系：*P* (*R*)

斜方晶系：*P, C, I, F*

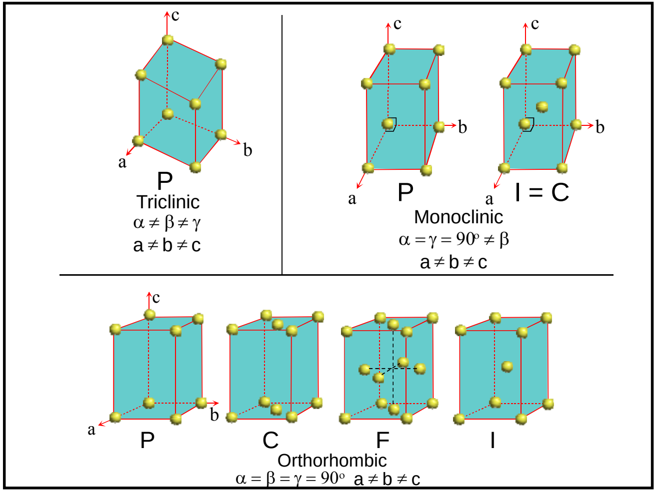
单斜晶系：*P, C*

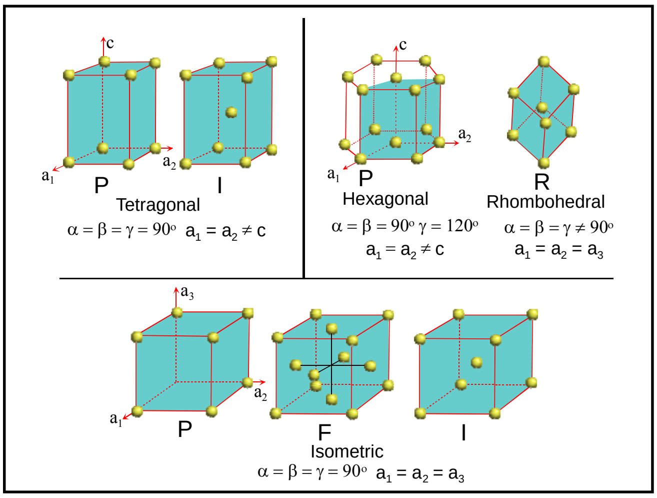
三斜晶系：*P*



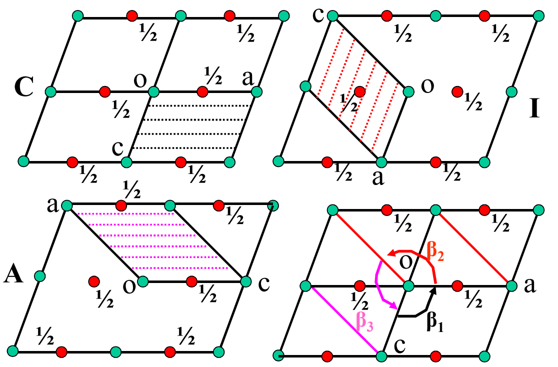


四方晶系*F*格子，可转为*I*格子.



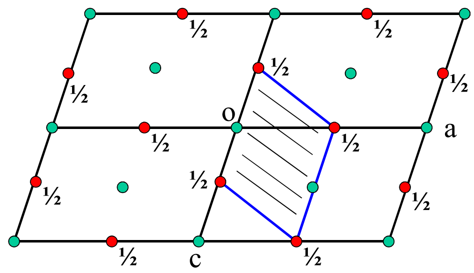


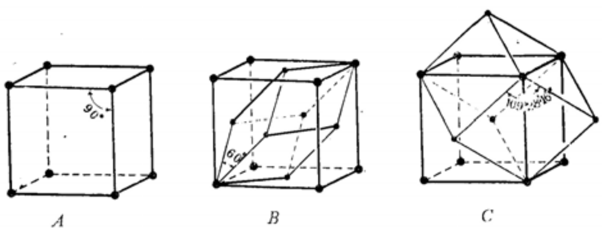
单斜晶系**C 心格子**与 **I 格子**、**A心格子**的相互转换关系



因$\beta_1+\beta_2+\beta_3=360°$，故总可以使其中之一满足$90° < \beta < 120°$

单斜晶系**F 格子**可转换为**C 格子**





当菱面体格子中α =90°、 60° 、109°28′16″，应分别划分为立方原始格子、立方面心格子和立方体心格子。

(返回)

分布在同一直线上的结点构成一个行列(row)。

联接分布在同一平面内的结点则构成一个面网(net)。

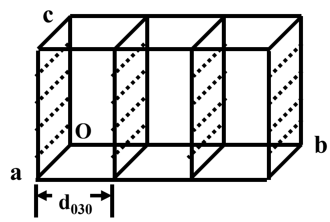
一个面网上，其单位面积内结点数称为面网密度。

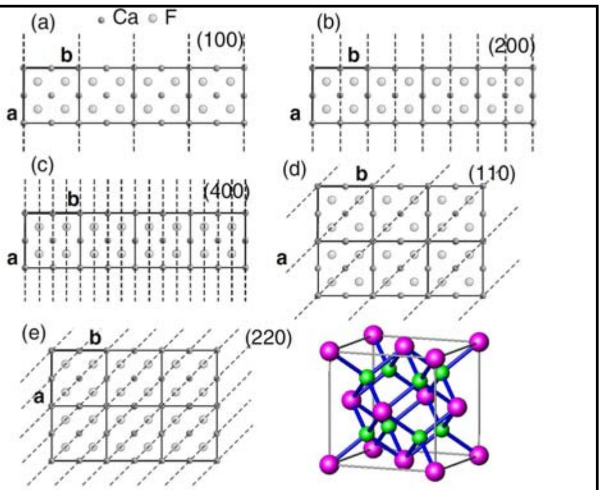
行列符号：用晶棱符号[*uvw*]表示;

面网符号：用晶面符号(*hkl*)表示;

如**(300)**----面网符号，表示一组相互平行且面网间距相等的面网。

如为单斜晶系，(030)面网的面网间距$d_{030}=b/3$；而(300)则为$d_{300}=a\sin\beta/3$。





晶面符号与面网符号之异同点：

相同点：都用截距系数的倒数比表示。

晶面符号	面网符号
用于描述晶体宏观外型	用于描述微观晶体内部结构
晶面数量少而有限，晶面指数简单如(100)等。	面网数量多而无限，面网指数可复杂如(32 32 10)等。
晶面符号(100)表示一个晶面	面网符号(100)表示一组相互平行的等间距的面网，有无穷多个。
晶面符号要约化成最简单整数	面网符号不可约化，如(800)
晶面符号没有"间距"	平行面网间有间距，称为"面网间距"，面网间距d_{hkl}: Interplanar distance,or spacing, of neighbouring net planes
晶面有一定形状、大小和晶面条纹。	面网为假想概念
Indices of a crystal face	Indices of a single **net plane**

在一组相互平行的面网中，任两相邻面网间的垂直距离，称为面网间距(interplanar spacing)，用 $\mathbf{d_{hkl}}$ 表示。

晶胞参数(**a**、**b**、**c**、**α**、**β**、**γ**、**V**)与**d**值和**hkl**的关系如下:

$d_{hkl}{}^2=(A/B)$；

$A=1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma$；

$B=h^2\sin^2\alpha/a^2+k^2\sin^2\beta/b^2+l^2\sin^2\gamma/c^2$

$+2kl(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)/bc$

$+2lh(\cos\gamma\cos\alpha-\cos\beta)/ac$

$+2hk(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)/ab$；

$V=abcA^{1/2}=abc\,(1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)^{1/2}$；

对于单斜晶系可简化为:
$(1/d_{hkl})^2=[h/(a\sin\beta)]^2+(k/b)^2+[l/(c\sin\beta)]^2-2hl\cos\beta/(ac\sin^2\beta)$;

斜方晶系为：$(1/d_{hkl})^2 = (h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2$;

三、六方晶系为：$(1/d_{hkl})^2 = 4(h^2+hk+k^2)/(3a^2)+(l/c)^2$；

四方晶系为：$(1/d_{hkl})^2 = (h^2+k^2)/a^2 + (l/c)^2$；

等轴晶系：$(1/d_{hkl})^2 = (h^2+k^2+l^2)/a^2$；

理论密度**Dx** = **1.66054 MZ/V**(单位：g/cm³，M为分子量、Z为单位晶胞内的分子数，V为晶胞体积(为10^{-30}m³))。

对于单斜晶系可简化为:
$(1/d_{hkl})^2=[h/(a\sin\beta)]^2+(k/b)^2+[l/(c\sin\beta)]^2-2hl\cos\beta/(ac\sin^2\beta)$;

$d_{100}=a\sin\beta$、$d_{010}=b$、$d_{001}=c\sin\beta$。

三、六方晶系为：$(1/d_{hkl})^2 = 4(h^2+hk+k^2)/(3a^2)+(l/c)^2$；

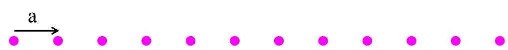
$d_{100}=a\sin\gamma$、$d_{010}=b\sin\gamma$、$d_{001}=c$。

斜方、四方和等轴晶系为:
$(1/d_{hkl})^2 = (h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2$；

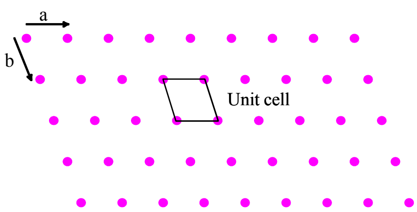
$d_{100}=a$、$d_{010}=b$、$d_{001}=c$。

(返回)

1-D translations = a row　　平移重复



- Translations (Lattices)
- 2-D translations = a net



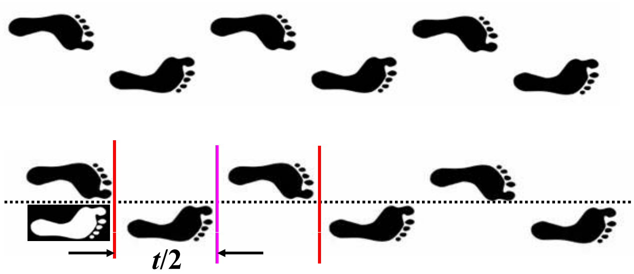
Unit Cell: the basic repeat unit that, by translation only, generates the entire pattern

一、平移轴(translation axis)

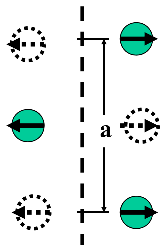
平移轴为一直线，图形沿此直线移动一定距离，可使相等部分重合。晶体结构沿着空间格子中的任意一条行列移动一个或若干个结点间距，可使每一质点与其相同的质点重合。因此，空间格子中的任一行列就是代表平移对称的平移轴。

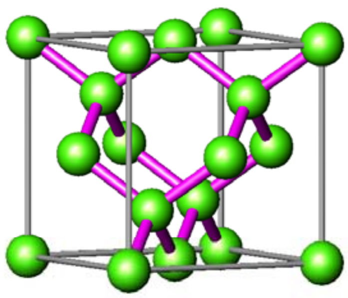
二、滑移面(glide planes)

滑移面是晶体结构中的一假想的平面，当结构对此平面反映，并平行此平面移动一定的距离后，构造中的每一个点与其相同的点重合，整个构造自相重合。



This displacement is the result of a mirror (the mirror of the human body) and half a period of translation. Here the translation is given by the distance between two consecutive footprints of the left (or right) foot. This type of displacement is called *a glide plane*(滑移面)：行进的脚印，对称面+1/2的周期平移。





滑移面按其滑移的方向和距离可分为a、b、c、e、n、d 六种，其中a、b和c 为轴向滑移面，e 为两个轴向滑移面， n为对角线滑移面，d 为金刚石滑移面。

内部对称要素　　相对应的　　外部对称要素

a, b, c, e, d, n　　　　**m**

m	Reflection plane, mirror plane	Reflection through a plane
	Reflection line, mirror line (two dimensions)	Reflection through a line
	Reflection point, mirror point (one dimension)	Reflection through a point
a, *b*, or *c*	'Axial' glide plane	Glide reflection through a plane, with glide vector
a	$\perp[010]$ or $\perp[001]$	$\frac{1}{2}\mathbf{a}$
b	$\perp[001]$ or $\perp[100]$	$\frac{1}{2}\mathbf{b}$
$c^{\dagger}$	$\perp[100]$ or $\perp[010]$	$\frac{1}{2}\mathbf{c}$
	$\perp[1\bar{1}0]$ or $\perp[110]$	$\frac{1}{2}\mathbf{c}$
	$\perp[100]$ or $\perp[010]$ or $\perp[\bar{1}\bar{1}0]$	$\frac{1}{2}\mathbf{c}$ hexagonal coordinate system
	$\perp[1\bar{1}0]$ or $\perp[120]$ or $\perp[\bar{2}\bar{1}0]$	$\frac{1}{2}\mathbf{c}$ hexagonal coordinate system
n	'Diagonal' glide plane	Glide reflection through a plane,
	$\perp[001]$; $\perp[100]$; $\perp[010]$	$\frac{1}{2}(\mathbf{a}+\mathbf{b})$; $\frac{1}{2}(\mathbf{b}+\mathbf{c})$; $\frac{1}{2}(\mathbf{a}+\mathbf{c})$
	$\perp[1\bar{1}0]$ or $\perp[01\bar{1}]$ or $\perp[\bar{1}01]$	$\frac{1}{2}(\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{c})$
	$\perp[110]$; $\perp[011]$; $\perp[101]$	$\frac{1}{2}(-\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{c})$; $\frac{1}{2}(\mathbf{a}-\mathbf{b}+\mathbf{c})$; $\frac{1}{2}(\mathbf{a}+\mathbf{b}-\mathbf{c})$
$d^{\dagger}$	'Diamond' glide plane	Glide reflection through a plane,
	$\perp[001]$; $\perp[100]$; $\perp[010]$	$\frac{1}{4}(\mathbf{a}\pm\mathbf{b})$; $\frac{1}{4}(\mathbf{b}\pm\mathbf{c})$; $\frac{1}{4}(\pm\mathbf{a}+\mathbf{c})$
	$\perp[1\bar{1}0]$; $\perp[01\bar{1}]$; $\perp[\bar{1}01]$	$\frac{1}{4}(\mathbf{a}+\mathbf{b}\pm\mathbf{c})$; $\frac{1}{4}(\pm\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{c})$; $\frac{1}{4}(\mathbf{a}\pm\mathbf{b}+\mathbf{c})$
	$\perp[110]$; $\perp[011]$; $\perp[101]$	$\frac{1}{4}(-\mathbf{a}+\mathbf{b}\pm\mathbf{c})$; $\frac{1}{4}(\pm\mathbf{a}-\mathbf{b}+\mathbf{c})$; $\frac{1}{4}(\mathbf{a}\pm\mathbf{b}-\mathbf{c})$

	方向	滑移距离
a	⊥[010] or [001]	**a/2**
b	⊥[100] or [001]	**b/2**
c	⊥[100] or [010]	**c/2**
	⊥[1-10] or [110]	**c/2**
	⊥[100] or [010] or [-1-10]	**c/2**(hexagonal coordinate system)
	⊥[1-10] or [120]or[-2-10]	
e	⊥ [001]	**a/2 and b/2(既可滑向a, 又可滑向b)**
	⊥[100]	**b/2 and c/2**
	⊥[010]	**a/2 and c/2**
	⊥[1-10] ; [110]	(a+b)/2 and c/2; (a-b)/2 and c/2
	⊥[01-1] ; [011]	(b+c)/2 and a/2; (b-c)/2 and a/2
	⊥[-101] ; [101]	(a+c)/2 and b/2; (a-c)/2 and b/2

	方向	滑移距离
n	⊥[100] ; [010]; [001]	**(b+c)/2; (a+c)/2; (a+b)/2**
	⊥[1-10] or [01-1]or [-101]	**(a+b+c)/2**
	⊥[110] ; [011] ; [101]	**(-a+b+c)/2; (a-b+c)/2; (a+b-c)/2**
d	⊥[100] ; [010]; [001]	**(b±c)/4; (±a+c)/4; (a±b)/4**
	⊥[1-10] ; [01-1]; [-101]	**(a+b±c)/4; (±a+b+c)/4; (a±b+c)/4**
	⊥[110] ; [011] ; [101]	**(-a+b±c)/4; (±a-b+c)/4; (a±b-c)/4**

a、b、c滑移面指轴向,平移二分之一轴单位;

n滑移面指面(或体)对角线方向,平移二分之一单位;

d滑移面指面(或体)对角线方向,平移四分之一单位;

e滑移面指两个方向,各滑移二分之一单位。

滑移面a ---⊥[010]

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{2}\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直b的对称面(x,-y,z) + a/2 → (x+½,-y, z)

a --- ⊥[001]

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{2}\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直c的对称面(x,y,-z) + a/2 → (x+½,y,-z)

请问a滑移面可不可以垂直[100]?

滑移面b --- ⊥[100]

$$\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&\frac{1}{2}\\0&0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直a的对称面(-x,y,z) + b/2 → (-x,y+½, z)

b--- ⊥[001]

$$\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&\frac{1}{2}\\0&0&-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直c的对称面(x,y,-z) + b/2 → (x,y+½,-z)

滑移面c ---⊥[100]

$$\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直a的对称面(-x,y,z) + c/2 → (-x,y, z+½)

c --- ⊥[010]

$$\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直b的对称面(x,-y,z) + c/2 → (x,-y, z+½)

滑移面n ---⊥[100]

$$\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&\frac{1}{2}\\0&0&1&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直a的对称面(-x,y,z) + (b+c)/2 → (-x,y+½, z+½)

n --- ⊥[010]

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{2}\\0&-1&0&0\\0&0&1&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直b的对称面(x,-y,z) + (a+c)/2 → (x +½,-y, z+½)

n --- ⊥[001]

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{2}\\0&1&0&\frac{1}{2}\\0&0&-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直c的对称面(x,-y,z) + (a+b)/2 → (x +½, y+½, -z)

滑移面d ---⊥[100]

$$\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&\frac{1}{4}\\0&0&1&\frac{1}{4}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直a的对称面(-x,y,z) + (b+c)/4 → (-x,y+¼, z +¼)

d --- ⊥[010]

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{4}\\0&-1&0&0\\0&0&1&\frac{1}{4}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直b的对称面(x,-y,z) + (a+c)/4 → (x+¼,-y, z +¼)

d --- ⊥[001]

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{4}\\0&1&0&\frac{1}{4}\\0&0&-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

相当于垂直c的对称面(x,-y,z) + (a+b)/4 → (x+¼, y+¼, -z)

滑移面e

---⊥[100]

$$\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&\frac{1}{2}\\0&0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

---⊥[010]

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{2}\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

---⊥[001]

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{2}\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&\frac{1}{2}\\0&0&-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

旋转楼梯:

爬旋转楼梯的过程是由旋转+上升---- 两个部分组成。

旋转轴+上升平移一定距离，则得到螺旋轴!

镜子	对称面(m)		宏观对称
行进的脚印	滑移面(a)	对称面+1/2的周期平移	微观对称
原地打转	旋转轴(2)		宏观对称
爬旋转楼梯	螺旋轴(2_1)	旋转+上升	微观对称

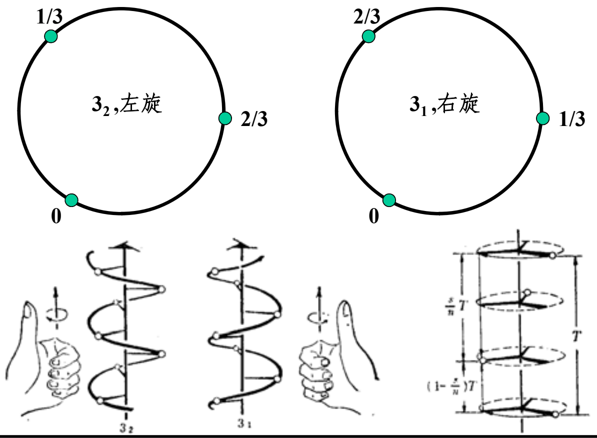
三、螺旋轴(screw axes)

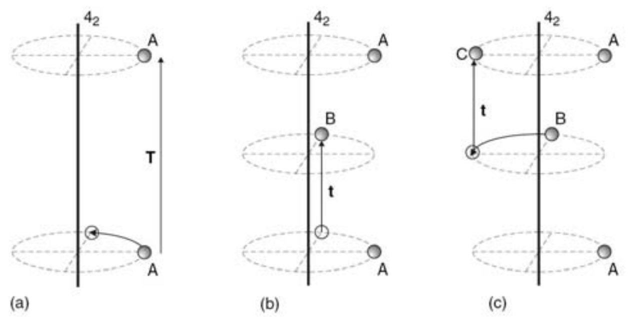
螺旋轴为晶体结构中的一条假想直线，当围绕此直线旋转一定角度，并向上平移一定距离后，结构中的每一质点都与其相同的质点重合，整个结构自相重合。

螺旋轴的国际符号用n_s表示，s 为小于n的自然数。*n=2*、*3*、*4*、*6*，相应的基转角为180°、120 °、90°、60°，质点的平移距离为(s/n)T。螺旋轴有2_1、3_1、3_2、4_1、4_2、4_3、6_1、6_2、6_3、6_4、6_5共11种。

外部对称	内部对称要素	平移量
2	2_1	½
3	3_1, 3_2	1/3, 2/3
4	4_1, 4_2, 4_3	¼, ½ , ¾
6	6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5	1/6,1/3, ½ ,2/3,5/6

3_1、3_2螺旋轴讨论的是有关三个不同高度原子之间的关系！

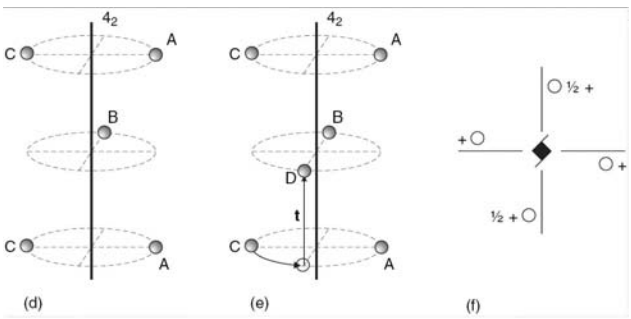




A逆时针旋转90°。

再平移(2/4)T，得到B。

B逆时针旋转90°，再平移(2/4)T，得到C。



C与C属于周期平移。

C逆时针旋转90°，再平移(2/4)T，得到D。

四个点A、C一个高度, B、D一个高度，两者差1/2。

2_1 --- // [100] **// [010]** ……

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{2}\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}\ (x+½,-y,-z) \qquad \begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&\frac{1}{2}\\0&0&-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}\ (-x,y+½,-z)$$

3_1 --- (3 // [001]) **3_1^2 ----- (3^2 // [001])**

$$\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&-1&0&0\\0&0&1&\frac{1}{3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}\ (-y,x-y,z+1/3) \qquad \begin{pmatrix}-1&1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&1&\frac{2}{3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}\ (-x+y,-x,z+2/3)$$

3_2 --- (3 // [001]) **3_2^2 -----(3^2 // [001])**

$$\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&-1&0&0\\0&0&1&\frac{2}{3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}\ (-y,x-y,z+2/3) \qquad \begin{pmatrix}-1&1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&1&\frac{1}{3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}\ (-x+y,-x,z+1/3)$$

4_1 --- (4 // [001]) **4_1^2 (2 // [001])** **4_1^3 (4^3 // [001])**

$$\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&\frac{1}{4}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix} \qquad 4^2+(0,0,½) \qquad \begin{pmatrix}0&1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&1&\frac{3}{4}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

4_2 ---(4 // [001]) **4_2^2 (2 // [001])** **4_2^3 (4^3 // [001])**

$$\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix} \qquad 4^2+(0,0,1) \qquad \begin{pmatrix}0&1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&1&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

4_3 ---(4 // [001]) **4_3^2 (2 // [001])** **4_3^3 (4^3 // [001])**

$$\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&\frac{3}{4}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix} \qquad 4^2+(0,0,½) \qquad \begin{pmatrix}0&1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&1&\frac{1}{4}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}$$

6_1 --- (6 // [001]) **$6^2=3$** **$6^3=2$** **$6^4=3^2$** **6^5**

$$\begin{pmatrix}1&-1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&\frac{1}{6}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}\ (x-y,x,z+1/6) \qquad \begin{pmatrix}0&1&0&0\\-1&1&0&0\\0&0&1&\frac{5}{6}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}\ (y,-x+y,z+5/6)$$

6_1 +(0,0,1/6); +(0,0,1/3); +(0,0,1/2); +(0,0,2/3); +(0,0,5/6);

6_2 +(0,0,1/3); +(0,0,2/3); +(0,0,1); +(0,0,1/3); +(0,0,2/3);

6_3 +(0,0,1/2); +(0,0,1); +(0,0,1/2); +(0,0,1); +(0,0,1/2);

6_4 +(0,0,2/3); +(0,0,1/3); +(0,0,1); +(0,0,2/3); +(0,0,1/3);

6_5 +(0,0,5/6); +(0,0,2/3); +(0,0,1/2); +(0,0,1/3); +(0,0,1/6);

小节：

外部宏观对称要素： → 1,2,3,4,6, -1,m,-4 共八个 → 对称要素组合定理 → 32个点群 → 用于描述原子轨道；47种几何单形,146种结晶学单形

内部微观对称要素： → 新增加:P(R), I, F, C (A, B); 2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5; a, b, c, d, e, n. → 对称要素组合定理 → 230个空间群 → 原子+对称 → 晶体结构

(返回)

空间群(Space group)：**晶体内部对称要素的组合。**

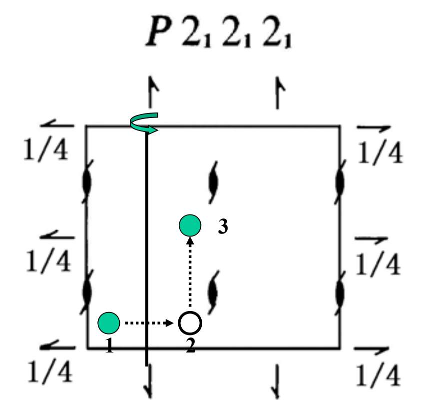
由费德洛夫和圣佛利斯独立推导出来的，共230种。

如：四方晶系四次对称轴，有*P*、*I* 两种格子，有4、4_1、4_2、4_3，进行排列组合可得：*P*4、*P*4_1、*P*4_2、*P*4_3、*I*4、*I*4_1、(*I*4_2=*I*4、*I*4_3=*I*4_1)等六种空间群。

空间群符号由两部分组成：格子类型+内部对称要素集合。

通常用四个"位置"表示，如P$2_12_12_1$。

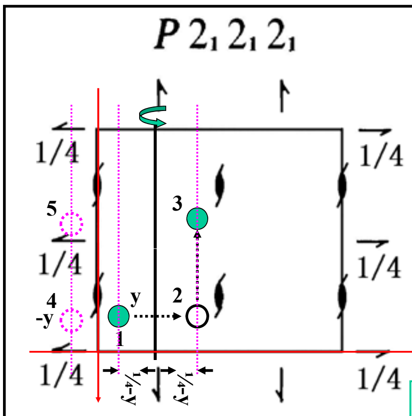
空间群→点群： a, b, c, e, n, d → m； 2_1→ 2； 3_1,3_2→3； 4_1, 4_2, 4_3→4； 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5→6。



Three non–intersecting pairs of // 2_1 axes

一个点群的全部对称要素，都经过晶体的几何中心，取其为原点，则所有对称要素均通过坐标原点。

而空间群则不同，对称要素可以不通过坐标原点，此时情况更为复杂。



Three non–intersecting pairs of // 2_1 axes

如设(1)点的坐标为(x,y,z); 则通过原点二次轴旋转应到(4)点，其坐标为(x,-y,-z). a方向再平移½，得(5)点，其坐标为(x+½,-y,-z);

现a方向2_1在(x,¼,0)上; 则通过二次轴旋转到(2)点，其坐标为(x,½-y,-z); a方向再平移½,得(3)点，其坐标为(x+½,½-y,-z);

(5)与(3)在b轴上相差½。

y+(¼-y)+ (¼-y)=½-y

***P*$2_12_12_1$ 空间有一个原子(x,y,z), 通过空间群的全部对称操作 E, 2_1(x,¼,0); 2_1(0,y,¼), 2_1(¼,0,z), 可得四个原子位置：d=¼, 附加位移为2d.**

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\\ 0 & -1 & 0 & \frac{1}{2}\\ 0 & 0 & -1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\\ 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}+x\\ \frac{1}{2}-y\\ -z\end{pmatrix}$$

2 (½,0,0) x,¼,0

→ (x+ ½, -y+ ½, -z)

The augmented matrix

$$\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & \frac{1}{2}\\ 0 & 0 & -1 & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\\ 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\ \frac{1}{2}+y\\ \frac{1}{2}-z\end{pmatrix}$$

2 (0,½,0) 0,y,¼

→(-x, y+ ½, -z+ ½)

$$\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\\ 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}-x\\ -y\\ \frac{1}{2}+z\end{pmatrix}$$

2 (0,0,½) ¼,0,z

→(-x+ ½, -y, z+ ½)

等效点系：指晶体结构中由一原始点经空间群中所有对称要素的作用所推导出来的规则点系。这些点所分布的空间位置称之为等效点系位置。

重复点数：一套等效点系在一个单位晶胞中所拥有的等效点系的数目。

重复点数与原始点在晶胞中所处的位置有关，该点的对称称为点位置的对称性。

如原始点处在某个(些)对称要素位置上，则得到的等效点系位置被称为特殊等效点系位置；

反之，处在一般位置上(点对称为1)，则称为一般等效点系位置。

不同的等效点系，分别给予不同的记号，用a、b、c、d、e、f等小写英文字母表示，称其为wyckoff符号。

晶系	空间群符号的方向			晶胞选取的条件
三斜晶系				c〈a〈b，γ角在60° ~120° 变化，α、β为非锐角，不大于120°
单斜晶系		[010]		c〈a，β角在90° ~120° 间变化，α＝γ＝90°
斜方晶系	[100]	[010]	[001]	c〈a〈b， α＝β＝γ＝90°
三方晶系	[001]	[100]		a＝b，α＝β＝90° ，γ＝120°
六方晶系	[001]	[100]	[120]	a＝b，α＝β＝90° ，γ＝120°
四方晶系	[001]	[100]	[110]	a＝b，α＝β＝γ＝90°
立方晶系	[001]	[111]	[110]	a＝b＝c，α＝β＝γ＝90°

三方晶系： a＝b＝c，α＝β＝γ， α≠90° 、60 ° 、109 ° 28′16 ″(立方晶系原始格子、面心格子、体心格子)

等轴晶系	三个轴单位必须相等，三个轴角必须均为90度。a=b=c, α=β=γ=90º.
四方晶系	两个轴单位必须相等，三个轴角必须均为90度。a=b, α=β=γ=90º.
六方晶系 三方晶系	两个轴单位必须相等，两个轴角必须均为90度，另一个必须为120度。a=b, α=β=90º，γ=120º.
斜方晶系	三个轴角必须均为90度，三个轴单位一般都不相等。α=β=γ=90º.
单斜晶系	两个轴角必须均为90度，三个轴单位一般都不相等。α= γ=90º.
三斜晶系	三个轴角一般都不为90度，三个轴单位一般都不相等。

晶系	空间群符号方向			
三斜晶系	None	None	None	
单斜晶系	None	[010] (//b)	None	
斜方晶系	[100] (//a)	[010] (//b)	[001] //(c)	
三方晶系(六方定向)	[001] (//c)	[100] (//a)、[010] (//b)、[-1-10] (//d)	None	
六方晶系	[001] (//c)	[100] (//a)、[010] (//b)、[-1-10] (//d)	[120] 、[1-10]、[-2-10]	面对角线方向
四方晶系	[001] (//c)	[100] (//a)、[010] (//b)	[110]、[1-10]	
立方晶系	[100] (//a) 、[010] (//b) 、[001] (//c)	[111] 、[1-1-1]、[-11-1]、[-1-11] (体对角线方向)	[110] 、[011]、[101]、[1-10]、[01-1]、[-101]	

de Wolff等(Acta Cryst. (1992). A48, 727–732)在1992提出了“双向滑移面(‘double’ glide planes e)的概念，共涉及:

斜方晶系的: *Abm*2 (No. 39), *Aba*2 (41), *Fmm*2 (42),*Cmca* (64), *Cmma* (67), *Ccca* (68), *Fmmm* (69);

四方晶系的: *I*4*mm* (107), *I*4*cm* (108), *I*-42*m* (121), *I*4/*mmm* (139), *I*4/*mcm* (140);

立方晶系的: *Fm*-3 (202), *Fm*-3*m* (225), *Fm*-3*c* (226), *I*-43*m* (217), *Im*-3*m* (229)。

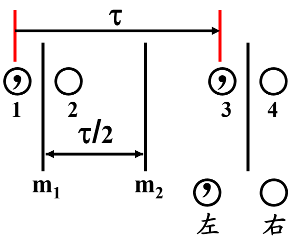
在国际晶体学表新版中(ITC(1994))对其中五种空间群符号进行了调整，它们分别是39、41、64、67和68号，新旧空间群符号对比，参见表 。

空间群	No. 39	No. 41	No. 64	No. 67	No. 68
原符号	*Abm*2	*Aba*2	*Cmca*	*Cmma*	*Ccca*
新符号	*Aem*2	*Aea*2	*Cmce*	*Cmme*	*Ccce*

微观对称元素增加了平移对称，其对称要素不再以“个”计，而以“组”为单位。如:

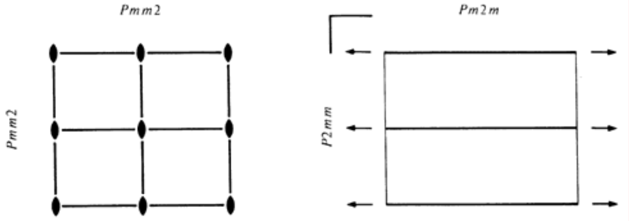
<u>两个相互平行的对称面的连续操作，其作用等同于一个平移操作，其平移的距离为两对称面间距的两倍。</u>

点(1)通过对称面(m_1)反映到点(2);
点(2)再通过对称面(m_2)反映到点(3),点(1)到点(4)。



$(m_1 \cdot m_2) = \tau$

C_{2v}^{1} -*Pmm*2(No.25)

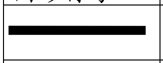
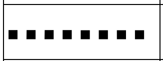
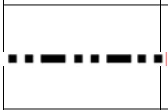
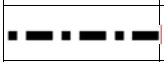
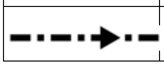


空间中两相互垂直的对称面***mm***, 通过***P***格子的平移***t***, 由于平移***t***可分解为两个相互平行且等间距的对称面的连续作用$t=(m_1 \cdot m_2)$,

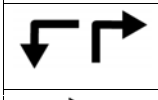
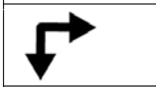
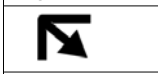
$m_{\perp a} \cdot m_{\perp b} \cdot m_{\perp b\ b/2} = 2_{//c} \cdot m_{\perp b\ b/2} = m_{\perp a\ a/2}$。

即对称面每隔***t***/2出现一次，同时两对称面的交线为一2次轴。

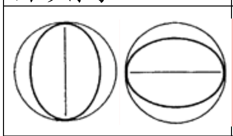
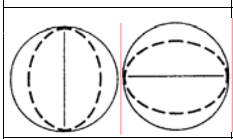
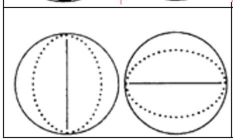
内部对称图形符号：对称平面垂直投影平面（一）

图形符号		
	***m***	Reflection plane, mirror plane 对称面
	***a, b, c***	‘Axial’ glide plane轴向滑移面 1/2滑移矢量在投影平面内沿虚线滑移
	***a, b, c***	‘Axial’ glide plane轴向滑移面 1/2滑移矢量垂直投影平面
	***e***	‘Double’ glide plane双向滑移面，含两个滑移矢量，一个1/2滑移矢量在投影平面内沿虚线滑移，一个1/2滑移矢量垂直投影平面。它只出现在带心晶胞中。
	***n***	‘Diagonal’ glide plane，对角滑移面，一个滑移矢量含两个分量，分量与*e*相同。
	***d***	‘Diamond’ glide plane，金刚石滑移面，与*n*相似，1/4滑移量，只出现在带心晶胞中

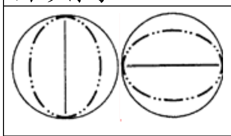
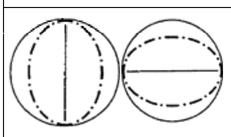
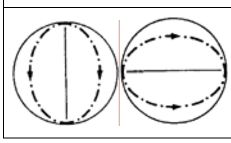
内部对称图形符号：对称平面平行投影平面（二）

图形符号		
	***m***	Reflection plane, mirror plane 对称面
	***a, b, c***	‘Axial’ glide plane轴向滑移面 1/2滑移矢量沿箭头方向滑移。
	***e***	‘Double’ glide plane双向滑移面，含两个滑移矢量，1/2滑移矢量沿箭头方向滑移。它只出现在带心晶胞中。
	***n***	‘Diagonal’ glide plane，对角滑移面，一个滑移矢量含两个分量，沿箭头方向滑移
	***d***	‘Diamond’ glide plane，金刚石滑移面，1/4滑移量，沿箭头方向滑移。只出现在带心晶胞中。

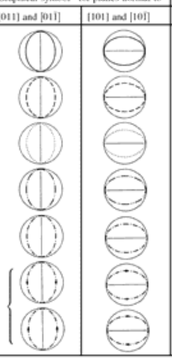
内部对称图形符号：对称平面与投影平面斜交（三）

图形符号		只出现在-43m和m-3m中
	***m***	Reflection plane, mirror plane 对称面
	***a, b***	[011]和[01-1]，1/2滑移矢量沿[100方向滑移。(左) [101]和[10-1]，1/2滑移矢量沿[010方向滑移。(右)
	***a, b***	[011]和[01-1]，1/2滑移矢量沿[01-1] 和[011]方向滑移。(左) [101]和[10-1]，1/2滑移矢量沿[10-1]和[101]方向滑移。(右)

内部对称图形符号：对称平面与投影平面倾斜（三）

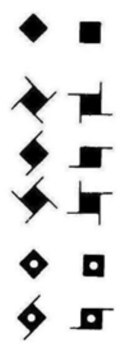
图形符号		
	***e***	[011]和[01-1],含两个滑移矢量，1/2滑移矢量沿[100]方向和[01-1]或[011]滑移。(左) [101]和[10-1]，1/2滑移矢量沿[010方向和[10-1]或[101]滑移。(右)
	***n***	[011]和[01-1]，1/2滑移矢量沿[11-1]或[111]方向滑移。(左) [101]和[10-1]，1/2滑移矢量沿[11-1]或[111]方向滑移。(右)
	***d***	[011]和[01-1]，1/2滑移矢量沿[1-11] 或[111]方向滑移。(左) [101]和[10-1]，1/2滑移矢量沿[-111]或[111]方向滑移。(右)

Symmetry planes inclined to the plane of projection (in cubic space groups of classes -43*m* and *m*-3*m* only)

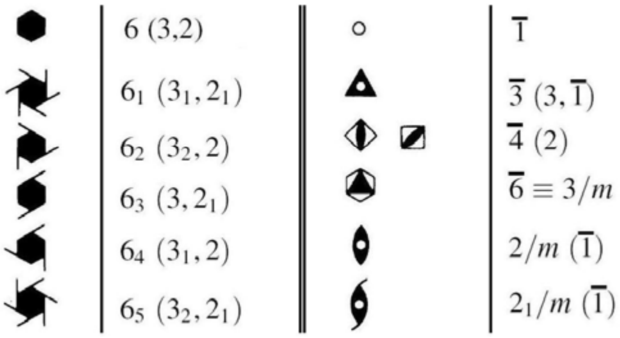


Symmetry plane	Graphical symbol* for planes normal to [011] and [01$\bar{1}$]	Graphical symbol* for planes normal to [101] and [10$\bar{1}$]	Glide vector in units of lattice translation vectors for planes normal to [011] and [01$\bar{1}$]	Glide vector in units of lattice translation vectors for planes normal to [101] and [10$\bar{1}$]	Printed symbol
Reflection plane, mirror plane			None	None	*m*
‘Axial’ glide plane			$\frac{1}{2}$ lattice vector along [100]	$\frac{1}{2}$ lattice vector along [010]	*a* or *b*
‘Axial’ glide plane			$\frac{1}{2}$ lattice vector along [01$\bar{1}$] or along [011]	$\frac{1}{2}$ lattice vector along [10$\bar{1}$] or along [101]	*a* or *b*
‘Double’ glide plane† [in space groups $I\bar{4}3m$ (217) and $Im\bar{3}m$ (229) only]			*Two* glide vectors: $\frac{1}{2}$ along [100] *and* $\frac{1}{2}$ along [01$\bar{1}$] or $\frac{1}{2}$ along [011]	*Two* glide vectors: $\frac{1}{2}$ along [010] *and* $\frac{1}{2}$ along [10$\bar{1}$] or $\frac{1}{2}$ along [101]	*e*
‘Diagonal’ glide plane			*One* glide vector: $\frac{1}{2}$ along [11$\bar{1}$] or along [111]‡	*One* glide vector: $\frac{1}{2}$ along [11$\bar{1}$] or along [111]‡	*n*
‘Diamond’ glide plane¶ (pair of planes; in centred cells only)			$\frac{1}{2}$ along [1$\bar{1}$1] or along [111]§	$\frac{1}{2}$ along [$\bar{1}$11] or along [111]§	*d*
			$\frac{1}{2}$ along [$\bar{1}$11] or along [111]§	$\frac{1}{2}$ along [111] or along [1$\bar{1}$1]§	

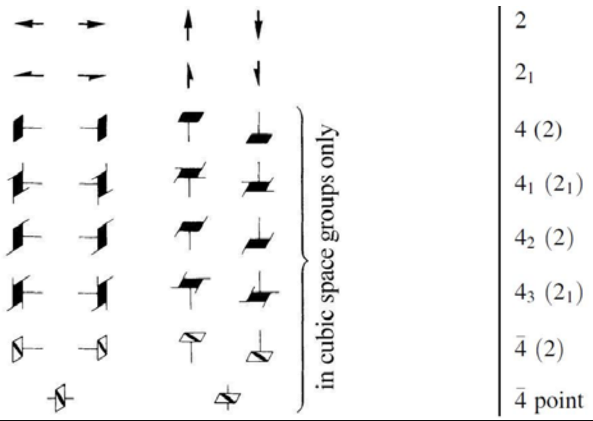
内部对称图形符号：对称轴垂直于投影平面（一）

	2 2_1 3 3_1 3_2 $6/m\ (\bar{6},\bar{3},3,2,\bar{1})$ $6_3/m\ (\bar{6},\bar{3},3,2_1,\bar{1})$		4 (2) $4_1\ (2_1)$ $4_2\ (2)$ $4_3\ (2_1)$ $4/m\ (\bar{4},2,\bar{1})$ $4_2/m\ (\bar{4},2,\bar{1})$

内部对称图形符号：对称轴垂直于投影平面（二）

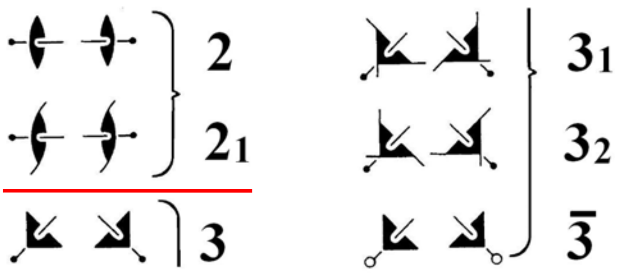


内部对称图形符号：对称轴平行于投影平面（三）



对称轴与投影面斜交(只出现于立方晶系)

平行于立方体面对角线　　平行于立方体体对角线



P 4_1 (No. 76), 右手系，90°代入；再180°，其次270°。

$$\begin{pmatrix} \cos(\frac{2\pi}{n}) & -\sin(\frac{2\pi}{n}) & 0 \\ \sin(\frac{2\pi}{n}) & \cos(\frac{2\pi}{n}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}_{//c} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -y \\ x \\ z+\frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

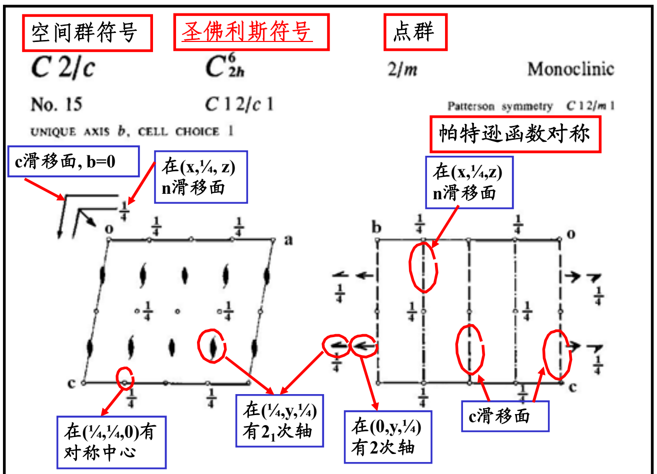
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{2}{4} \end{pmatrix}_{//c} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z+\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

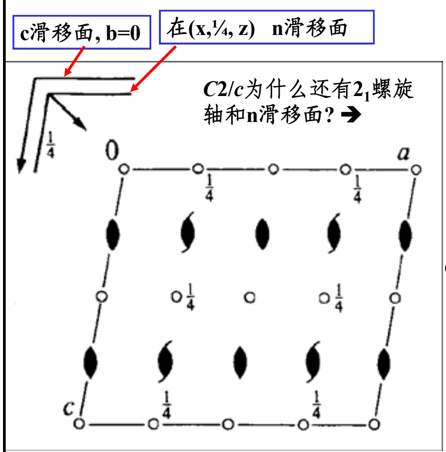
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{3}{4} \end{pmatrix}_{//c} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ -x \\ z+\frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

(1). x, y, z; (2). -y, x, 0.25+z; (3). -x, -y, 0.5+z; (4). y, -x, 0.75+z

P 4_3 (No. 78)

(1). x, y, z; (2). -y, x, 0.75+z; (3). -x, -y, 0.5+z; (4). y, -x, 0.25+z





*C*格子，
则有(a+b)/2

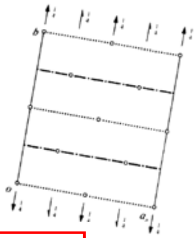
*C*格子与2次轴组合，
$(a+b)/2 \cdot 2_{//b} =$
$a/2 \cdot 2_{1\ //b} =$
$2_{1\ //b\ \ a/4} =$

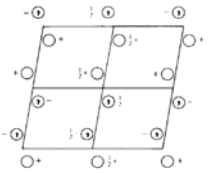
即在距2次旋转轴a/4处，有2_1螺旋轴。

*C*格子与*c*滑移面组合

$(a+b)/2 \cdot c_{\perp b} =$
$m_{\perp b} \cdot a/2 \cdot b/2 \cdot c/2 =$
$m_{\perp b} \cdot (a+c)/2 \cdot b/2 =$
$n_{\perp b} \cdot b/2 = n_{\perp b\ \ b/4}$

即在距*c*滑移面b/4处，有*n*滑移面.





原点选在c滑移面的对称中心上

在(0,y,¼)有2次轴

不对称单位

在(¼,y,¼)有2_1次轴

在(x,¼,z)n滑移面

Origin at $\bar{1}$ on glide plane c

Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{1}{4};\ 0 \le y \le \frac{1}{2};\ 0 \le z \le \frac{1}{2}$

Symmetry operations

For (0,0,0)+ set

(1) 1 (2) 2 0,y,¼ (3) $\bar{1}$ 0,0,0 (4) c x,0,z

For (½,½,0)+ set

(1) t(½,½,0) (2) 2(0,½,0) ¼,y,¼ (3) $\bar{1}$ ¼,¼,0 (4) n(½,0,½) x,¼,z

---

CONTINUED No. 15 $C\,2/c$

Generators selected (1); t(1,0,0); t(0,1,0); t(0,0,1); t(½,½,0); (2); (3)

衍射条件

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates (0,0,0)+ (½,½,0)+				Reflection conditions
							General:
8	f	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x},y,\bar{z}+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$	(4) $x,\bar{y},z+\frac{1}{2}$	hkl: $h+k=2n$; $h0l$: $h,l=2n$; $0kl$: $k=2n$; $hk0$: $h+k=2n$; $0k0$: $k=2n$; $h00$: $h=2n$; $00l$: $l=2n$
							Special: as above, plus
4	e	2	0,y,¼	0,$\bar{y}$,¾			no extra conditions
4	d	$\bar{1}$	¼,¼,½	¾,¼,0			hkl: $k+l=2n$
4	c	$\bar{1}$	¼,¼,0	¾,¼,½			hkl: $k+l=2n$
4	b	$\bar{1}$	0,½,0	0,½,½			hkl: $l=2n$
4	a	$\bar{1}$	0,0,0	0,0,½			hkl: $l=2n$

重复点数

(放大)

Symmetry of special projections

Along [001] $c\,2mm$
$\mathbf{a}'=\mathbf{a}_p$ $\mathbf{b}'=\mathbf{b}$
Origin at 0,0,z

Along [100] $p\,2gm$
$\mathbf{a}'=\frac{1}{2}\mathbf{b}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{c}_p$
Origin at x,0,0

Along [010] $p\,2$
$\mathbf{a}'=\frac{1}{2}\mathbf{c}$ $\mathbf{b}'=\frac{1}{2}\mathbf{a}$
Origin at 0,y,0

Maximal non-isomorphic subgroups

I [2]$C\,1\,2\,1$ ($C\,2$) (1; 2)+
[2]$C\,\bar{1}$ ($P\,\bar{1}$) (1; 3)+
[2]$C\,1c\,1$ (Cc) (1; 4)+

IIa [2]$P\,1\,2/c\,1$ ($P\,2/c$) 1; 2; 3; 4
[2]$P\,1\,2/n\,1$ ($P\,2/c$) 1; 2; (3; 4)+(½,½,0)
[2]$P\,1\,2_1/n\,1$ ($P\,2_1/c$) 1; 3; (2; 4)+(½,½,0)
[2]$P\,1\,2_1/c\,1$ ($P\,2_1/c$) 1; 4; (2; 3)+(½,½,0)

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [3]$C\,1\,2/c\,1$ ($\mathbf{b}'=3\mathbf{b}$)($C\,2/c$); [3]$C\,1\,2/c\,1$ ($\mathbf{c}'=3\mathbf{c}$)($C\,2/c$);
[3]$C\,1\,2/c\,1$ ($\mathbf{a}'=3\mathbf{a}$ or $\mathbf{a}'=3\mathbf{a}, \mathbf{c}'=-\mathbf{a}+\mathbf{c}$ or $\mathbf{a}'=3\mathbf{a}, \mathbf{c}'=\mathbf{a}+\mathbf{c}$)($C\,2/c$)

Minimal non-isomorphic supergroups

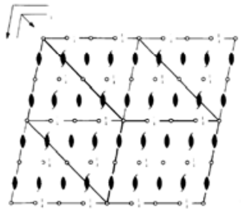
I [2]$Cmcm$; [2]$Cmca$; [2]$Cccm$; [2]$Ccca$; [2]$Fddd$; [2]$Ibam$; [2]$Ibca$; [2]$Imma$; [2]$I\,4_1/a$; [3]$P\,\bar{3}\,1\,2/c$;
[3]$P\,\bar{3}\,2/c\,1$; [3]$R\,\bar{3}\,2/c$

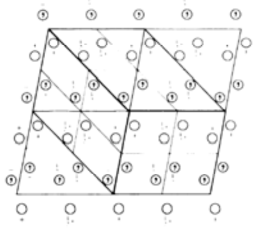
II [2]$F\,1\,2/m\,1$ ($C\,2/m$); [2]$C\,1\,2/m\,1$ ($2\mathbf{c}'=\mathbf{c}$)($C\,2/m$); [2]$P\,1\,2/c\,1$ ($2\mathbf{a}'=\mathbf{a}, 2\mathbf{b}'=\mathbf{b}$)($P\,2/c$)

$C\,2/c$ C_{2h}^6 $2/m$ Monoclinic

No. 15

UNIQUE AXIS b, DIFFERENT CELL CHOICES





$C\,1\,2/c\,1$

UNIQUE AXIS b, CELL CHOICE 1

Origin at $\bar{1}$ on glide plane c

Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{1}{4};\ 0 \le y \le \frac{1}{2};\ 0 \le z \le \frac{1}{2}$

Generators selected (1); t(1,0,0); t(0,1,0); t(0,0,1); t(½,½,0); (2); (3)

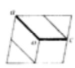
Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates (0,0,0)+ (½,½,0)+				Reflection conditions
							General:
8	f	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x},y,\bar{z}+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$	(4) $x,\bar{y},z+\frac{1}{2}$	hkl: $h+k=2n$; $h0l$: $h,l=2n$; $0kl$: $k=2n$; $hk0$: $h+k=2n$; $0k0$: $k=2n$; $h00$: $h=2n$; $00l$: $l=2n$
							Special: as above, plus
4	e	2	0,y,¼	0,$\bar{y}$,¾			no extra conditions
4	d	$\bar{1}$	¼,¼,½	¾,¼,0			hkl: $k+l=2n$
4	c	$\bar{1}$	¼,¼,0	¾,¼,½			hkl: $k+l=2n$
4	b	$\bar{1}$	0,½,0	0,½,½			hkl: $l=2n$
4	a	$\bar{1}$	0,0,0	0,0,½			hkl: $l=2n$

CONTINUED No. 15 $C\,2/c$

$A\,1\,2/n\,1$

UNIQUE AXIS b, CELL CHOICE 2



Origin at $\bar{1}$ on glide plane n

Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{1}{2};\ 0 \le y \le 1;\ 0 \le z \le \frac{1}{4}$

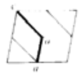
Generators selected (1); t(1,0,0); t(0,1,0); t(0,0,1); t(0,½,½); (2); (3)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates (0,0,0)+ (0,½,½)+				Reflection conditions
							General:
8	f	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x}+\frac{1}{2},y,\bar{z}+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$	(4) $x+\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$	hkl: $k+l=2n$; $h0l$: $h,l=2n$; $0kl$: $k+l=2n$; $hk0$: $k=2n$; $0k0$: $k=2n$; $h00$: $h=2n$; $00l$: $l=2n$
							Special: as above, plus
4	e	2	¼,y,¼	¾,$\bar{y}$,¾			no extra conditions
4	d	$\bar{1}$	½,¼,¼	0,¼,¾			hkl: $h=2n$
4	c	$\bar{1}$	0,¼,¼	½,¼,¾			hkl: $h=2n$
4	b	$\bar{1}$	0,½,0	½,½,½			hkl: $h+k=2n$
4	a	$\bar{1}$	0,0,0	½,0,½			hkl: $h+k=2n$

I 1 2/*a* 1

UNIQUE AXIS *b*, CELL CHOICE 3



Origin at $\bar{1}$ on glide plane *a*

Asymmetric unit $0 \le x \le 1$; $0 \le y \le \frac{1}{4}$; $0 \le z \le \frac{1}{2}$

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; $t(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$; (2); (3)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	Coordinates	Reflection conditions
	$(0,0,0)+$ $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})+$	General:
8 *f* 1	(1) x,y,z (2) $\bar{x}+\frac{1}{2},y,\bar{z}$ (3) $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$ (4) $x+\frac{1}{2},\bar{y},z$	$hkl: h+k+l=2n$; $h0l: h,l=2n$; $0kl: k+l=2n$; $hk0: h+k=2n$; $0k0: k=2n$; $h00: h=2n$; $00l: l=2n$
		Special: as above, plus
4 *e* 2	$\frac{1}{4},y,0$ $\frac{3}{4},\bar{y},0$	no extra conditions
4 *d* $\bar{1}$	$\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}$ $\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}$	
4 *c* $\bar{1}$	$\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}$ $\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}$	$hkl: l=2n$
4 *b* $\bar{1}$	$0,\frac{1}{2},0$ $\frac{1}{2},\frac{1}{2},0$	
4 *a* $\bar{1}$	$0,0,0$ $\frac{1}{2},0,0$	$hkl: h=2n$

如La_2Ni_3, 其空间群为*Cmca*(No. 64),

有a=5.113(8), b=9.731(6), c=7.907(5), 90, 90, 90

La1	8f	0.5,	0.1563,	0.0904
Ni1	8e	0.25,	0.419,	0.25
Ni2	4a	0,	0,	0

空间群*Cmca* (a方向为一对称面、b方向为一c滑移面、c方向为一*a*滑移面),

对a=5.113(*m*), b=9.731(*c*), c=7.907(*a*) 进行坐标变化,

1、*ba-c*： a=9.731(*c*), b=5.113(*m*), c=7.907(*a*)

Cmca → 调整位置为*Ccma*,

因原来a轴已变为新b轴→ 变方向 *Ccmb*

对a=5.113(*m*), b=9.731(*c*), c=7.907(*a*)进行坐标变化

2、*cab*: a=7.907(*a*), b=5.113(*m*), c=9.731(*c*)

cab → 即c轴换到a轴, c → a, a → b, b → c.

Cmca →空间群符号位置调整*Camc*.

注意: a方向不应有a滑移面, c方向不应有c滑移面.

因原来的a轴已变成新的b轴(需将*a*滑移面变为*b*滑移面), a→ b, *Camc* → *Cbmc*.

原来的*c* 轴已变为新的*a*轴(需将c滑移面变为a滑移面, *C*格子变为*A*格子), c→a, *Cbmc* → *Abma*.

正交晶系晶胞可有六种不同的取向:

abc	ba-c	cab	-cba	bca	a-cb
Cmca	*Ccmb*	*Abma*	*Acam*	*Bbcm*	*Bmab*
Ccca *Pbcn* *Cmcm* *Pnna*					

*A, B, C*格子类型和*a, b, c*滑移面具有方向性，随坐标轴选取的不同，要发生变化。

其它 (1)格子类型(*P, I, F, R*)和(2) 滑移面(*e, n, d*)以及其它对称要素：对称面, 旋转轴, 旋转反伸轴和螺旋轴等, 均不随坐标轴选取的不同而改变。

230个(晶体学)空间群(crystallographic space-group types), 219个仿射空间群(affine space-group types).

11对 "对映结构体空间群"(enantiomorphic space-group types).

$P4_1$---$P4_3$,	$P4_122$---$P4_322$,	$P4_12_12$---$P4_32_12$,
$P3_1$---$P3_2$,	$P3_121$---$P3_221$,	$P3_112$---$P3_212$,
$P6_1$---$P6_5$,	$P6_2$---$P6_4$,	$P6_122$---$P6_522$,
$P6_222$---$P6_422$	$P4_132$---$P4_332$.	

在230个空间群中, 有65个不含对称中心、且不含旋转反伸轴(-1,-2, -3, -4, -6)、不含对称面和不含滑移面的空间群称为手性空间群.

Triclinic (三斜晶系) *P*1.

Monoclinic (单斜晶系) *P*2, $P2_1$, *C*2.

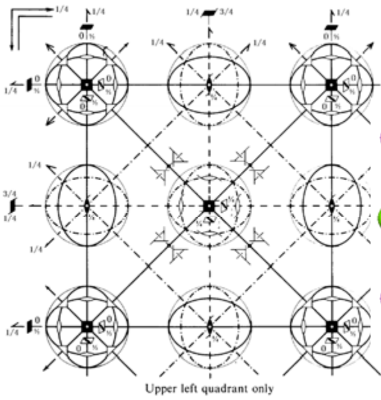
Orthorhombic (正交、斜方晶系) *P*222, $P222_1$, $P2_12_12$, $P2_12_12_1$, $C222_1$, *C*222, *F*222, *I*222, $I2_12_12_1$.

Tetragonal(四方晶系) *P*4, $P4_1$, $P4_2$, $P4_3$, *I*4, $I4_1$, *P*422, $P42_12$, $P4_122$, $P4_12_12$, $P4_222$, $P4_22_12$, $P4_322$, $P4_32_12$, *I*422, $I4_122$.

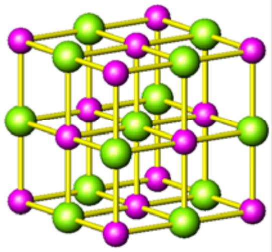
Trigonal(三方晶系) *P*3, $P3_1$, $P3_2$, *R*3, *P*312, *P*321, $P3_112$, $P\ 3_121$, $P3_212$, $P3_221$, *R*32.

Hexagonal(六方晶系) *P*6, $P6_1$, $P6_5$, $P6_2$, $P6_4$, $P6_3$, *P*622, $P6_122$, $P6_522$, $P6_222$, $P6_422$, $P6_322$.

Cubic(立方、等轴晶系) *P*23, *F*23 , *I*23, $P2_13$, $I2_13$, $P4_32$, $P4_232$, *F*432, $F4_132$, *I*432, $P4_332$, $P4_132$, $I4_132$.



Fm-3m, NaCl



(返回)

晶格缺陷: 指在晶体结构中的局部范围内，质点排律偏离了格子构造规律的现象。

晶体结构通常用X射线衍射法测定，X射线测定的是平均结构。

1、点缺陷

空位、填隙、替位等

2、线缺陷

刃位错、螺旋位错、混合位错等

3、面缺陷

堆垛层错、晶界等

(返回)

重复点数	Wyckoff letter	位置对称	特殊等效点系位置	
4	*e*	2	$0, y, \frac{1}{4}$	$0, \bar{y}, \frac{3}{4}$
4	*d*	$\bar{1}$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 0$
4	*c*	$\bar{1}$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$
4	*b*	$\bar{1}$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
4	*a*	$\bar{1}$	$0, 0, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$