

晶体结构的对称性— 从点阵到空间群

中国科学院物理研究所
董成

主要内容

- ❖ 晶体的平移对称性：三维点阵和晶胞
- ❖ 晶体学中的对称操作元素：
(旋转轴、倒反中心、镜面、反轴、映轴、螺旋轴和滑移面)
- ❖ 晶体学点群，晶系和点阵型式
- ❖ 空间群及其应用：空间群符号，等效点系，分数坐标，不对称单位

晶体性质

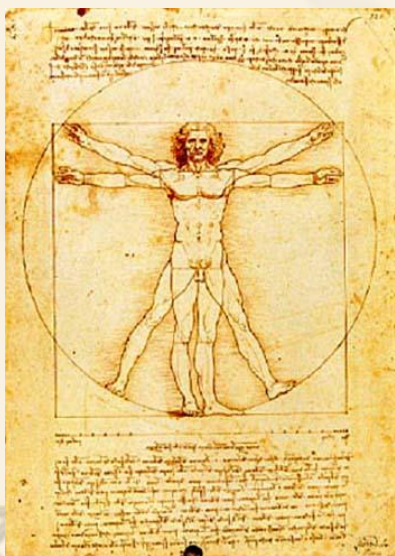
晶体是原子(包括离子, 原子团)在三维空间中周期性排列形成的固体物质。晶体有以下的共同性质:

1. 均匀性;
2. 各向异性;
3. 自范性;
4. 对称性;
5. 稳定性。



对称性的不同含义

- ❖ 物体的组成部分之间或不同物体之间特征的对应、等价或相等的关系。（希腊字根=类似尺寸的。）
- ❖ 由于平衡或和谐的排列所显示的美。
- ❖ 形态和（在中分平面、中心或一个轴两侧的）组元的排列构型的精确对应。

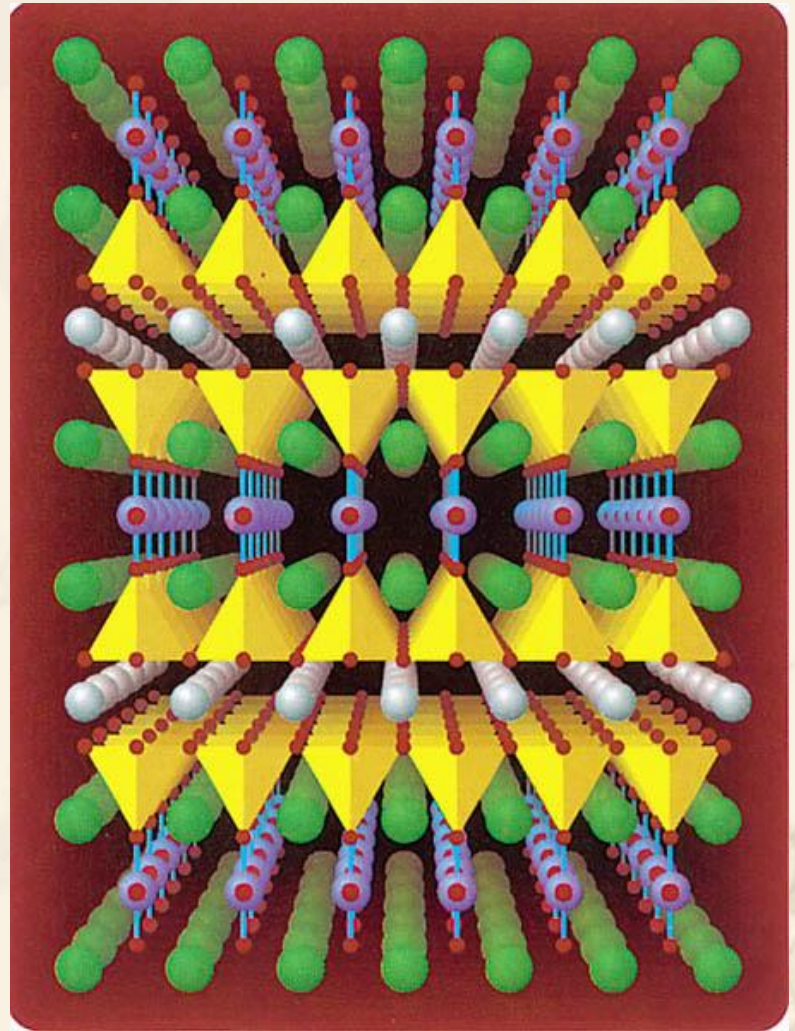
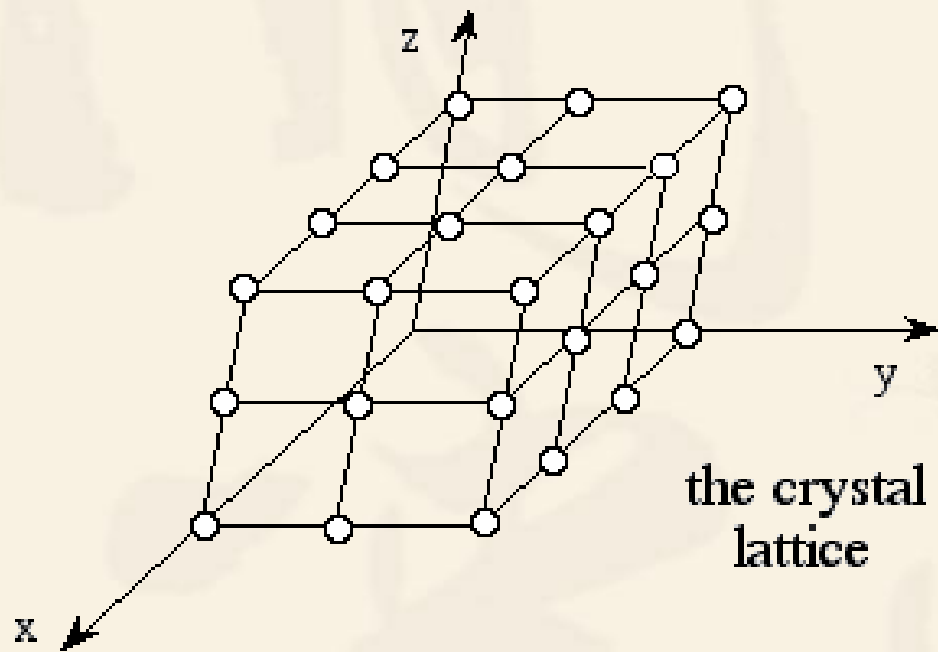


回文词

雾窗寒对遥天暮	暮天遥对寒窗雾
花萼正啼鹄	鹄啼正萼花
袖罗垂影瘦	瘦影垂罗袖
风剪一丝红	红丝一剪风

晶体结构的对称性-董成

晶格



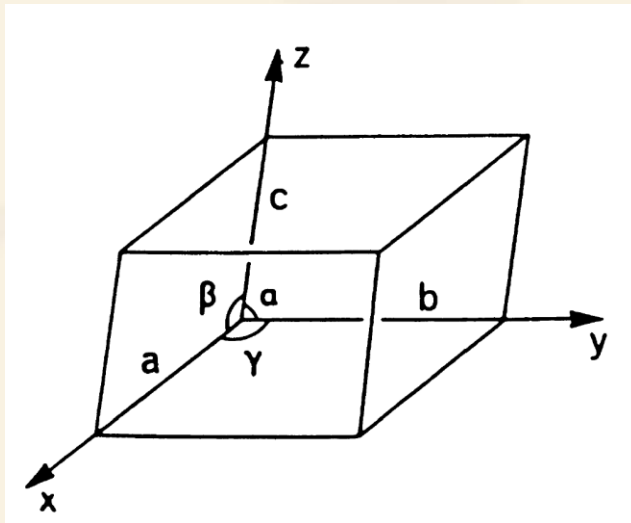
晶体结构的对称性-董成

晶体点阵与晶体对称性

- ❖ 在每个重复周期都选取一个代表点，就可以用三维空间点阵来描述晶体的平移对称性。而**平移对称性是晶体最为基本的对称性**。整个点阵沿平移矢量 $\mathbf{t} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$ (u, v, w 为任意整数) 平移，得到的新空间点阵与平移前一样，称沿矢量 $\mathbf{t}$ 的平移为**平移对称操作**。

晶体点阵与晶体对称性

- ❖ 点阵是一组无限的点，连接其中任意两点可以得到一个矢量，点阵按此矢量平移后都能复原。三维空间点阵是在三维空间中点的无限阵列，其中所有的点都有相同的环境。选任意一个阵点作为原点，三个不共面的矢量 a ， b 和 c 作为坐标轴的基矢，这三个矢量得以确定一个平行六面体如下：



此平行六面体称为晶胞。

晶胞

- ❖ 如上确定的六面体称为晶胞，由矢量 a ， b 和 c 确定的方向称为晶体学的晶轴 X ， Y ， Z 。
 - ❖ 如果晶胞中只包含一个阵点，则这种晶胞被称为初基的 (primitive)。
 - ❖ 晶胞的大小和形状可以用晶胞参数来表示，即用晶胞的三个边的长度 a ， b ， c 三个边之间的夹角 α ， β ， γ 表示。
 - ❖ 晶胞包含描述晶体结构所需的最基本结构信息。如果知道了晶胞中全部原子的坐标，就有了晶体结构的全部信息。
- 一般写作：晶体结构=点阵+结构基元；但准确的描述应为：
晶体结构=点阵*结构基元；晶体结构=结构基元@点阵

晶胞的选取

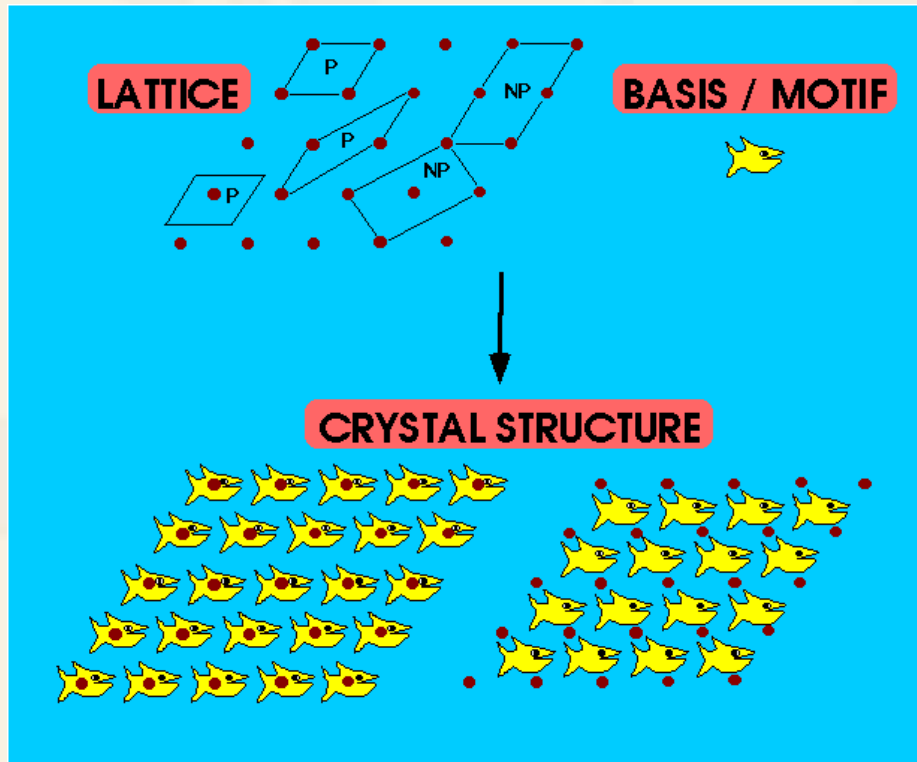
- ❖ 晶胞的选取可以有多种方式，但在实际确定晶胞时，要尽可能选取对称性高的初基单胞，还要兼顾尽可能反映晶体内部结构的对称性，所以有时使用对称性较高的非初基胞—惯用晶胞。
 - (1) 符合整个空间点阵的对称性。
 - (2) 晶轴之间相交成的直角最多。
 - (3) 体积最小。
 - (4) 晶轴交角不为直角时，选最短的晶轴，且交角接近直角。

点阵、结构和单胞

1. **点阵**：晶体的周期性，忽略填充空间的实际结构(分子)。
2. **点阵矢量**：由点阵矢量移动晶体到一个等效位置的平移。
3. **初基点阵矢量**：可选择的最小点阵矢量。
4. **初基晶胞**：初基点阵矢量定义的平行六面体，仅包含一个点阵点。
5. **晶体结构**：原子在晶体中的周期性排列。它可以通过在每点阵点安放一个称为基元（或型主）的一组原子来描述。

不要混淆点阵点和原子

1. 阵点是在空间中无穷小的点。
2. 原子是实在物体。
3. 阵点不必处于原子中心。



晶体结构=
结构基元@点阵
晶体结构是在每个
点阵点上安放
一个结构基元。

三维晶胞的原子计数

❖ 在晶胞不同位置的原子由不同数目的晶胞分享：

1. 顶角原子 $\Rightarrow 1/8$
2. 棱上原子 $\Rightarrow 1/4$
3. 面上原子 $\Rightarrow 1/2$
4. 晶胞内部 $\Rightarrow 1$

石墨晶体结构

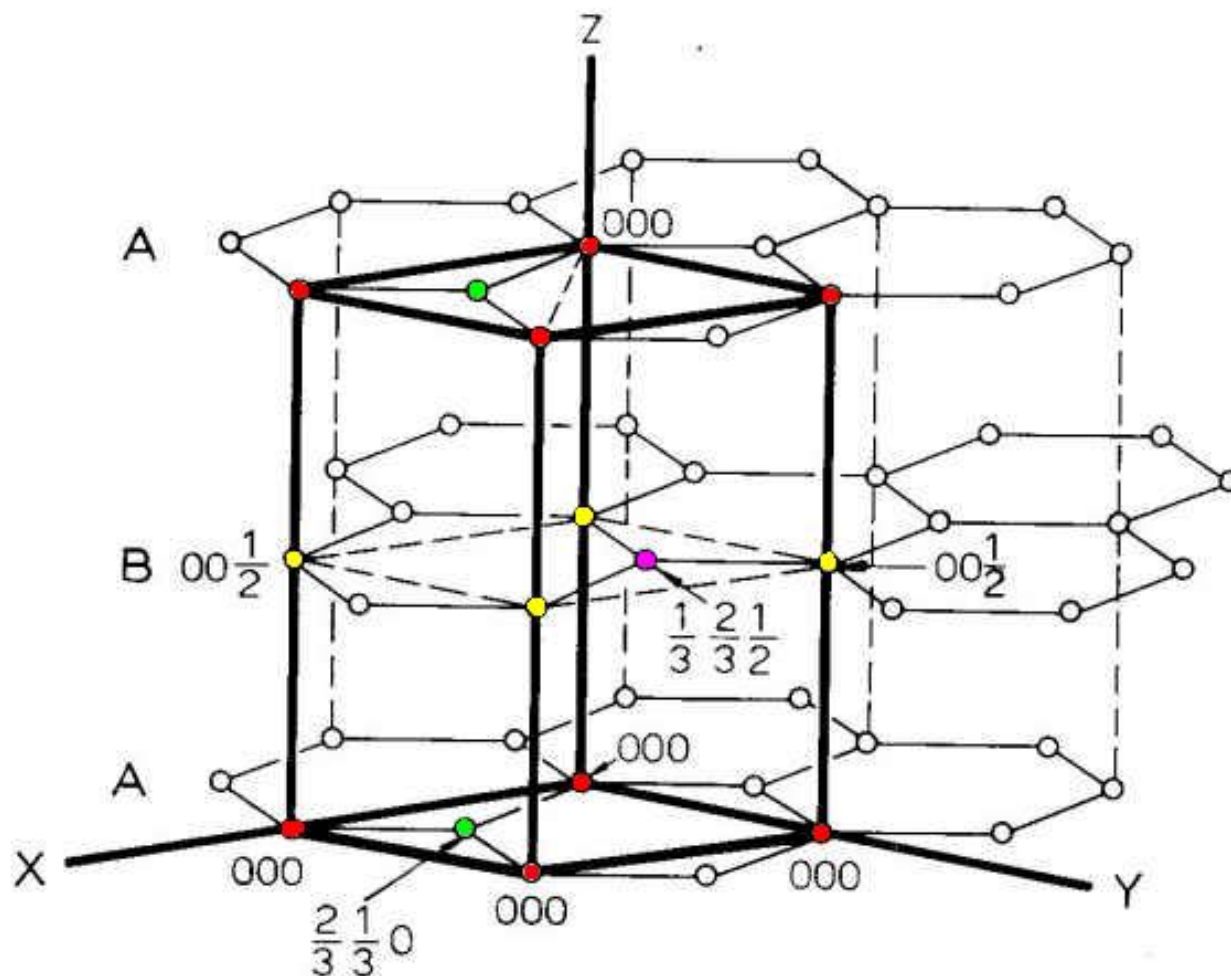


Fig. 1.1(a). The ideal graphite crystal structure with the hexagonal unit cell, the crystal axes and the coordinates of the four different lattice sites.

三维点阵和晶胞

使用矢量 $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$ 和 $\mathbf{c}$ 指定点阵：在所有两个点阵点之间的矢量($\mathbf{r}$)满足关系， $\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$ ，其中 u 、 v 和 w 是整数。

指定晶体中的任意点：

$\mathbf{r} = (u+x)\mathbf{a} + (v+y)\mathbf{b} + (w+z)\mathbf{c}$ ，其中 u ， v ， w 为整数

$$\mathbf{r} = (u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}) + (x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c})$$

x 、 y 、 z 是在晶胞之内指定一个位置的**分数坐标**。 x 、 y 、 z 用晶胞边长的分数表示，在0-1之间变化。晶胞原点的分数坐标总是0，0，0。用相同分数坐标 x 、 y 和 z 指定的所有位置都对称等价。（由于晶体的三维周期性，在分数坐标上加减任意整数，仍然表示平移对称的等价位置。）

晶体学中的对称操作元素

- ❖ 分子和晶体都是对称图像，是由若干个相等的部分或单元按照一定的方式组成的。对称图像是一个能经过不改变其中任何两点间距离的操作后复原的图像。这样的操作称为**对称操作**。
- ❖ 在操作中保持空间中至少一个点不动的对称操作称为**点对称操作**，如简单旋转和镜像转动(反映和倒反)是**点式操作**；使空间中所有点都运动的对称操作称为**非点式操作**，如平移，螺旋转动和滑移反映。

对称操作和对称元素

- ❖ **对称操作**：一个物体运动或变换，使得变换后的物体与变换前不可区分（复原，重合）。
- ❖ **对称元素**：在对称操作中保持不变的几何图型：点、轴或面。
- ❖ **点群**：保留一点不变的对称操作群。
- ❖ **空间群**：为扩展到三维物体例如晶体的对称操作群，由点群对称操作和平移对称操作组合而成；由 **32** 晶体学点群与 **14** 个 **Bravais** 点阵组合而成；空间群是一个单胞（包含单胞带心）的平移对称操作；反射、旋转和旋转反演等点群对称性操作、以及螺旋轴和滑移面对称性操作的组合。

全同操作

- ❖ (1)全同操作(Identity), 符号表示为1 (E), 对应于物体不动的对称操作, 对应的变换矩阵为单位矩阵。

注意: 符号表示为国际符号也称为赫尔曼-毛古因Hermann-Mauguin符号, 括号内为熊夫利斯Schönflies 符号。

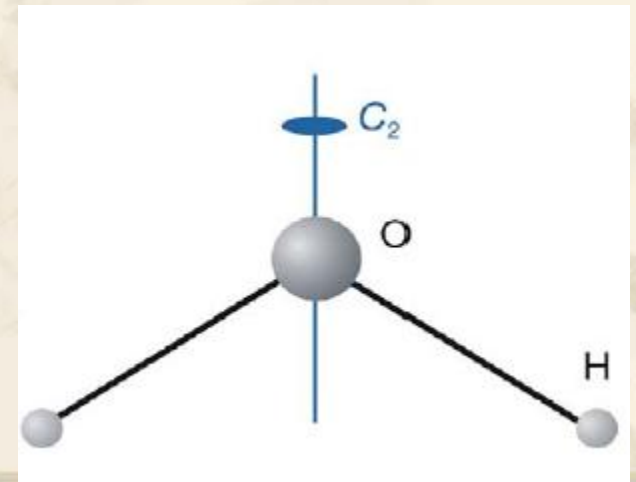
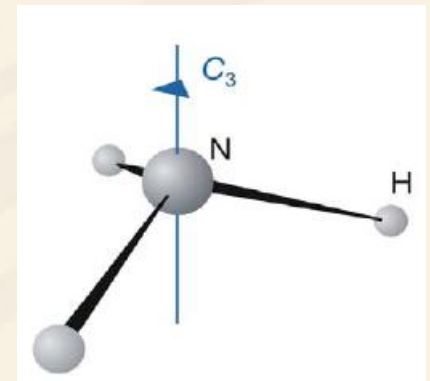
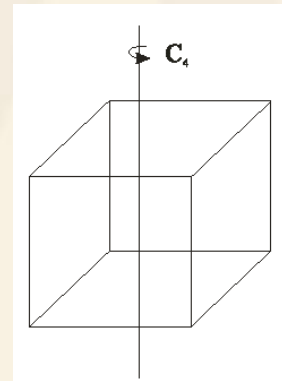
矩阵表示

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad E = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

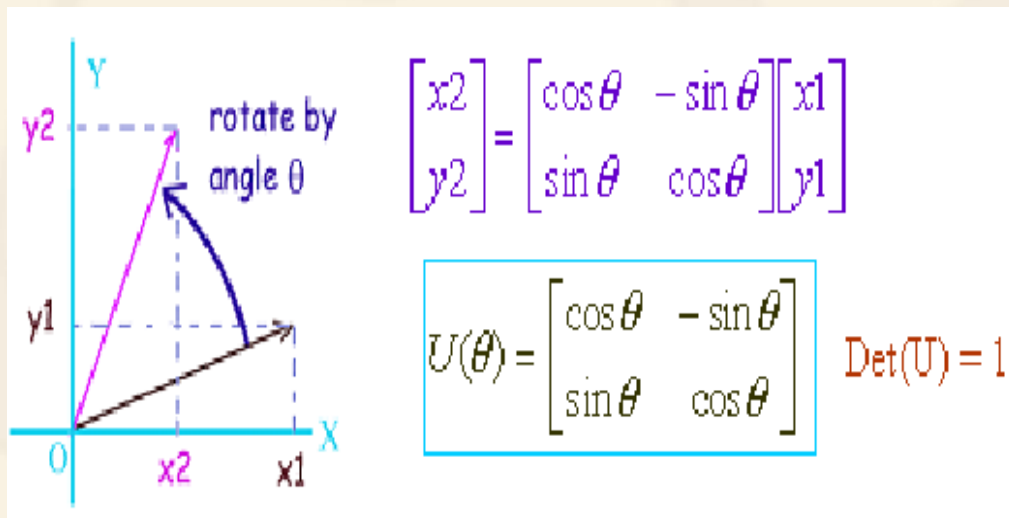
旋转轴

- ❖ (2)旋转轴(旋转轴)：绕某轴反时针旋转 $\theta = 360/n$ 度， n 称为旋转轴的次数(或重数)，符号为 $n (C_n)$ 。其变换矩阵为：

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



旋转矩阵



$$x_1 = r \cdot \cos \alpha$$

$$y_1 = r \cdot \sin \alpha$$

$$x_2 = r \cdot \cos(\alpha + \phi)$$

$$= r \cdot (\cos \alpha \cdot \cos \phi - \sin \alpha \cdot \sin \phi) = x_1 \cos \phi - y_1 \sin \phi$$

$$y_2 = r \cdot \sin(\alpha + \phi)$$

$$= r \cdot (\sin \alpha \cdot \cos \phi + \cos \alpha \cdot \sin \phi) = y_1 \cos \phi + x_1 \sin \phi$$

$$x_2 = x_1 \cdot \cos \phi - y_1 \cdot \sin \phi$$

$$y_2 = y_1 \cdot \cos \phi + x_1 \cdot \sin \phi$$

$$\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{bmatrix}$$

$$R_z(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$C_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C_2 = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix} \text{ around z axis}$$

$$C_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C_4 = \begin{pmatrix} y \\ -x \\ z \end{pmatrix} \text{ around z axis}$$

晶体中的旋转轴限制

练习题：

1. 平移对称性对旋转轴的次数 n 有很大的限制，证明在晶体学中只能出 $n=1,2,3,4,6$ 的旋转轴。
2. 写出沿三个坐标轴 X ， Y 和 Z 的4次旋转轴的表示矩阵。

矩阵乘法

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix}$$

The diagram shows the matrix multiplication process. The first matrix has rows $[-1, 0, 0]$, $[0, -1, 0]$, and $[0, 0, 1]$. The second matrix has columns $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$. Colored arrows indicate the dot products: a red arrow from the first row to the first column, a blue arrow from the second row to the second column, and a green arrow from the third row to the third column. The resulting vector $\begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix}$ has its components boxed in corresponding colors: $-x$ in red, $-y$ in blue, and z in green.

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{x} \\ -\mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} \text{2次旋转矩} \\ \text{阵} \end{matrix}$$

倒反中心 (Inversion center)

倒反中心：也称为反演中心或对称中心(Center of symmetry)，它的操作是通过一个点的倒反(反演)，使空间点的每一个位置由坐标为(x、y、z)变换到(-x，-y，-z)。符号为 i ， $\bar{1}$ 变换矩阵为

$$i = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad i = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix}$$

反映面—镜面

- ❖ **反映面**，也称**镜面**，反映操作是从空间某一点向反映面引垂线，并延长该垂线到反映面的另一侧，在延长线上取一点，使其到反映面的距离等于原来点到反映面的距离。符号为 $m(\sigma)$ 。
- ❖ 为了表示反映面的方向，可以在其符号后面标以该面的法线。如法线为 $[010]$ 的反映面，可记为 $m[010]$ 。

$$\{m[010]\} (x, y, z) = (x, -y, z)$$

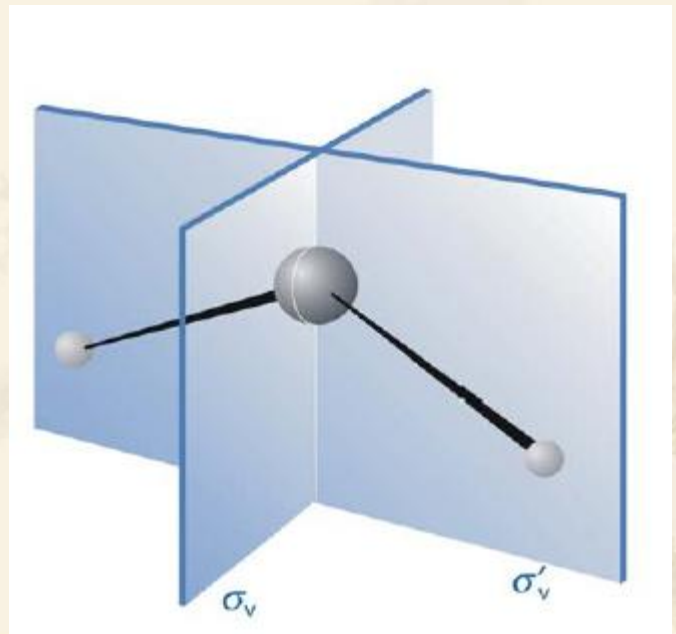
$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

镜面类型和矩阵表示

- ❖ 关于对称平面（或镜面） σ 的反映，可以平行于(vertical, σ_v) 或 垂直于(horizontal, σ_h) 主轴。
- ❖ 在二个 C_2 轴之间角平分线的一个垂直平面叫作双面镜面， σ_d （dihedral plane）。

$$\sigma_v = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_v = \begin{pmatrix} -x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

通过yz面的反映。



旋转倒反轴-反轴

- ❖ 旋转倒反轴，简称反轴 (**Axis of inversion , Rotoinversion axis**), 其对称操作是先进行旋转操作(**n**)后立刻再进行倒反操作，这样的复合操作称为记为 $\bar{n}$

组合成这种复合操作的每一个操作本身不一定是对称操作。其矩阵表示为：

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos\theta & \sin\theta & 0 \\ \sin\theta & -\cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

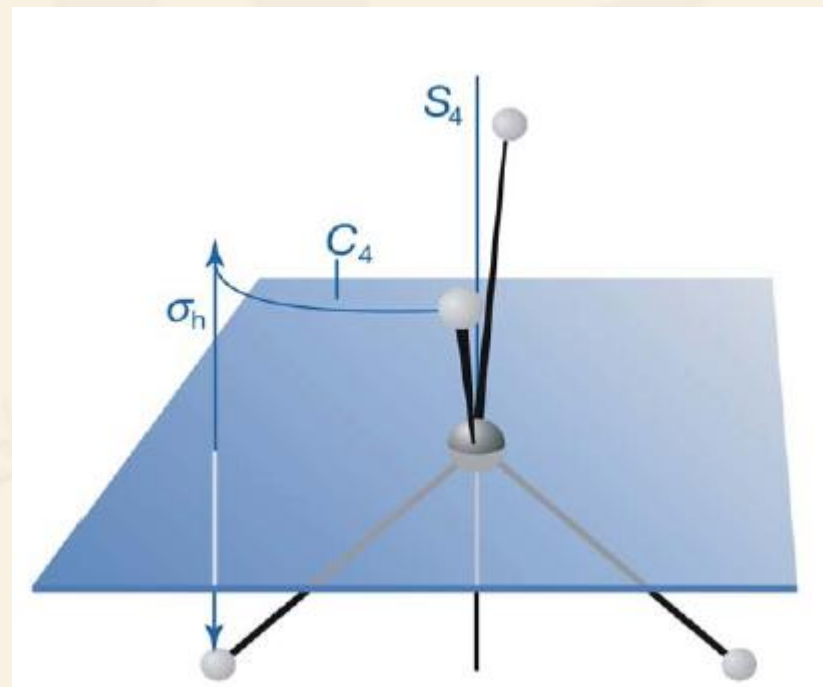
旋转反映轴—映轴

- ❖ 旋转反映轴，简称映轴 (rotoreflection axis)，其对称操作是先进行绕映轴的旋转操作(n)后立刻再对垂直于该映轴的反映面进行反映操作m。符号为 $\tilde{n}$ (S_n)，设对称轴沿[001]方向，其矩阵表示为：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

旋转反映 S_n

- ❖ 旋转反映 S_n ，包括绕对称轴的逆时针旋转 $360^\circ/n$ ，接着作垂直反射。
- ❖ 旋转反演和旋转反映（**Improper rotation**）被（译）称为异常旋转、非真旋转、不当旋转等。



反轴和映轴间的对应关系

- ❖ 用映轴表示的对称操作都可以用反轴表示，所以在新的晶体学国际表中只用反轴。
- ❖ 所有的点对称操作实际上可以简单的分为简单旋转操作和旋转倒反操作两种。全同操作就是一次真旋转轴，倒反中心为一次反轴，镜面为二次反轴，所有映轴都可以用等价反轴表示。

反轴和映轴间的对应关系

- ❖ 旋转倒反轴和旋转反映轴之间存在简单的一一对应关系，旋转角度为 θ 的反轴和旋转角为 $(\theta-\pi)$ 的映轴是等价的对称轴，这一关系也很容易从他们的表示矩阵看出。所以1次， 2次， 3次， 4次和6次反轴分别等价于2次， 1次， 6次， 4次和3次映轴。

$$\bar{1} = \tilde{2}, \bar{2} = \tilde{1}, \bar{3} = \tilde{6}, \bar{4} = \tilde{4}, \bar{6} = \tilde{3}$$

练习题

1. 证明：(1) 倒反中心是一次反轴；(2) 镜面是二次反轴。
2. 找出一个立方体具有的所有旋转轴。(6个2次轴， 4个3次轴， 3个4次轴。)

非点式对称操作

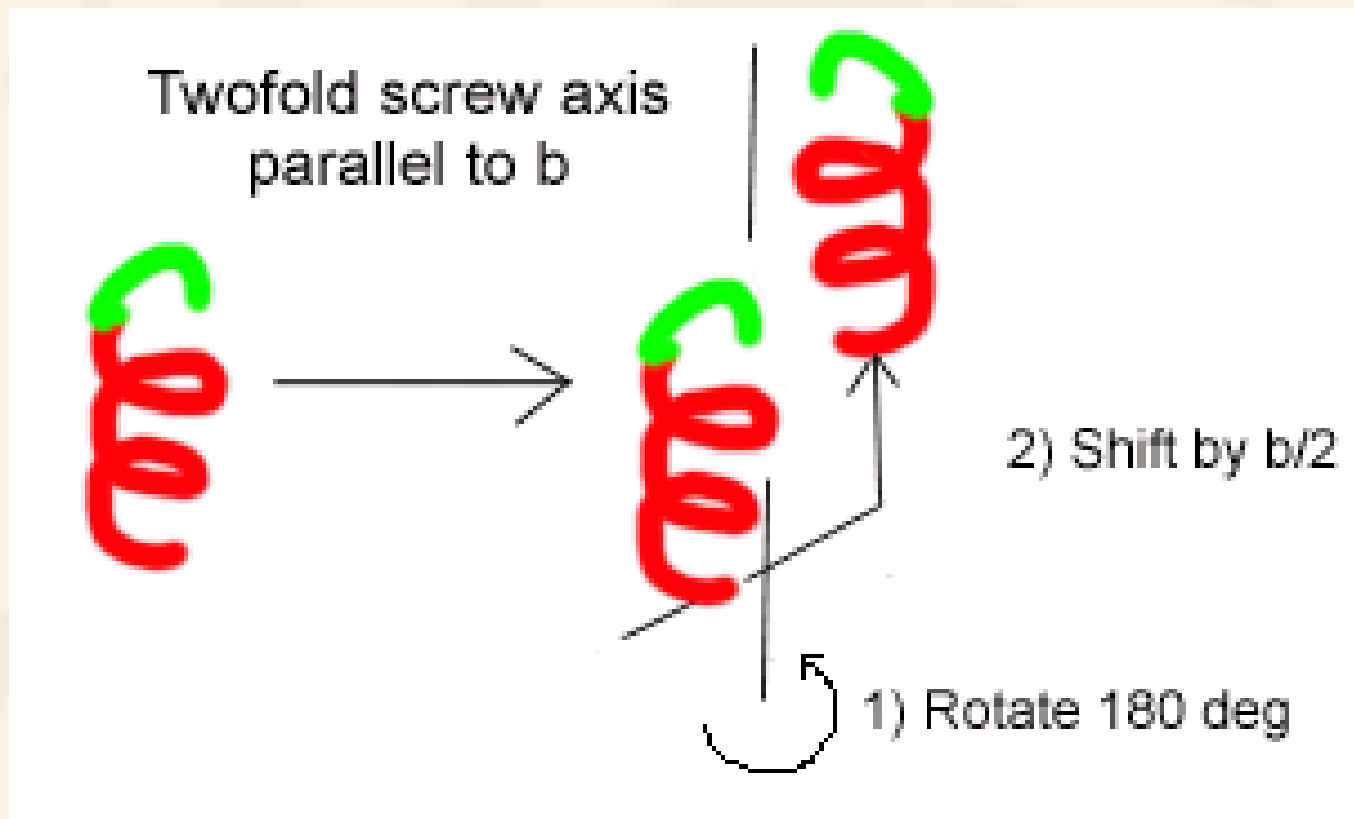
- ❖ 非点式对称操作：是由点式操作与平移操作复合后形成的新的对称操作，平移和旋转复合形成能导出螺旋旋转，平移和反映复合能导出滑移反映。

螺旋轴

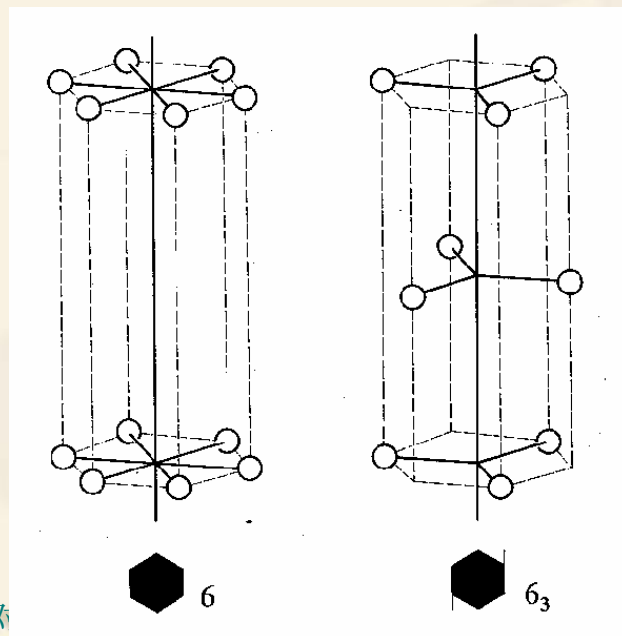
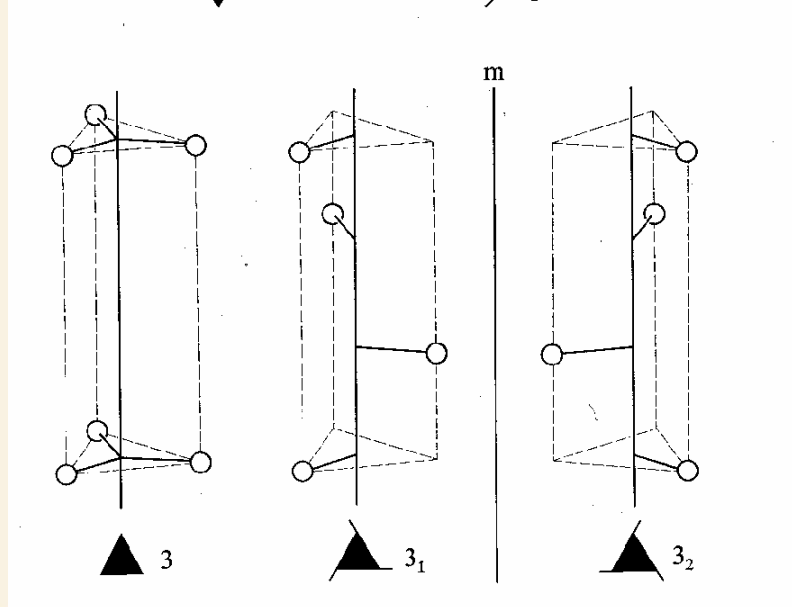
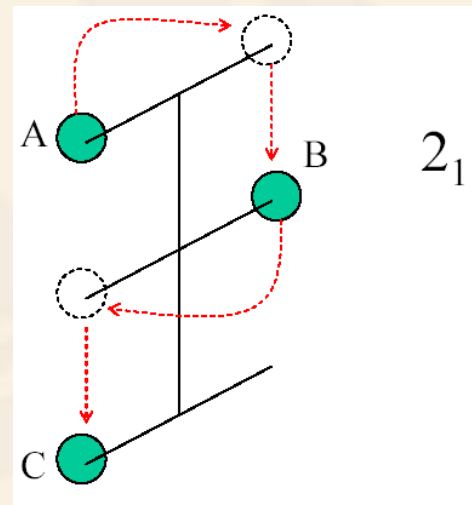
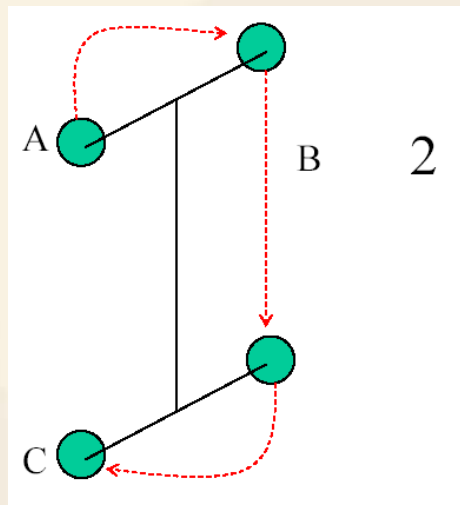
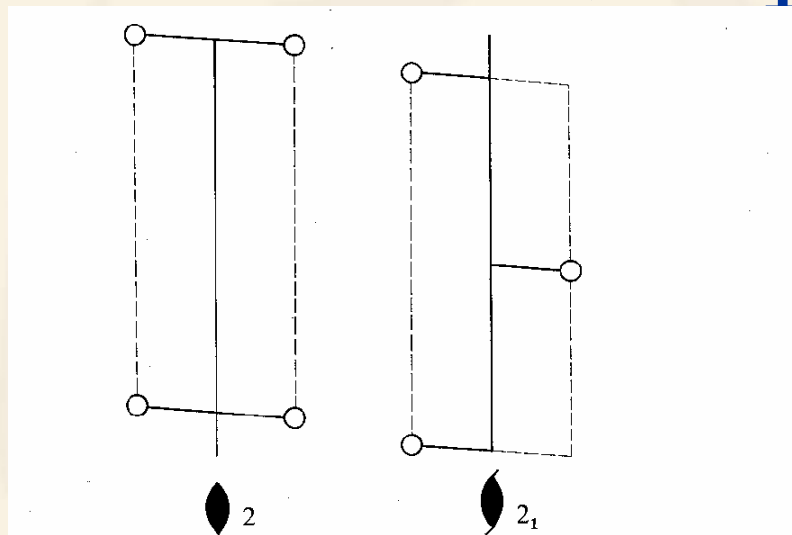
- ❖ **螺旋轴**：先绕轴进行逆时针方向 $360/n$ 度的旋转，接着作平行于该轴的平移，平移量为 $(p/n)t$ ，这里 t 是平行于转轴方向的最短的晶格平移矢量，符号为 np ， n 称为螺旋轴的次数，（ n 可以取值2,3,4,6），而 p 只取小于 n 的整数。所以可以有以下11种螺旋轴：

$2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$ 。

二次螺旋轴



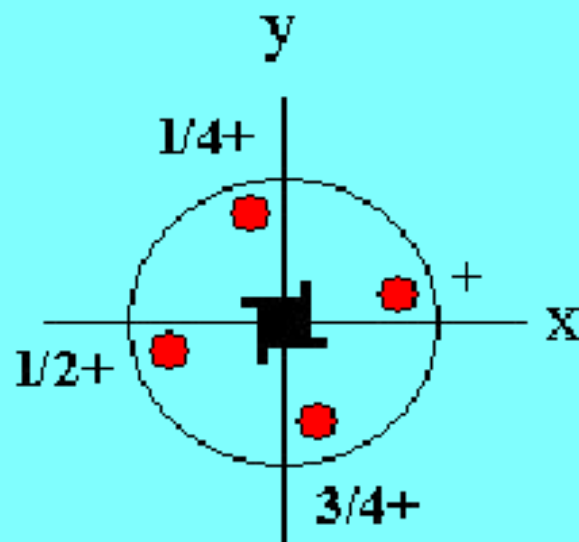
螺旋轴 2_1 , 3_1 , 3_2 , 6_3



螺旋轴 4_1 , 4_2 , 4_3

- ❖ 4_1 和 4_3 彼此对映。当其中之一是左手螺旋时，另一个为右手螺旋。

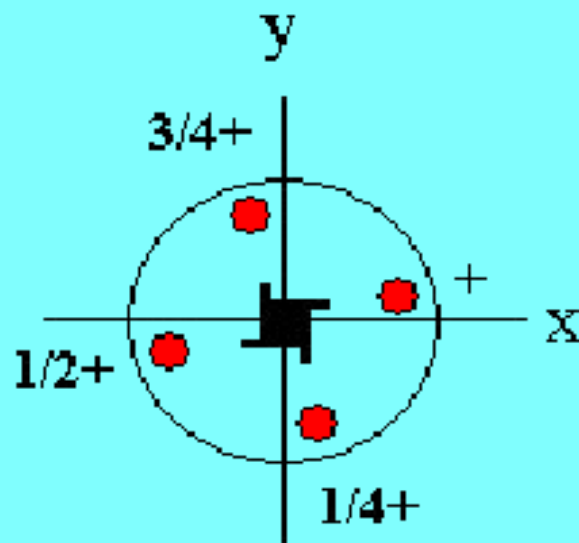
4_1



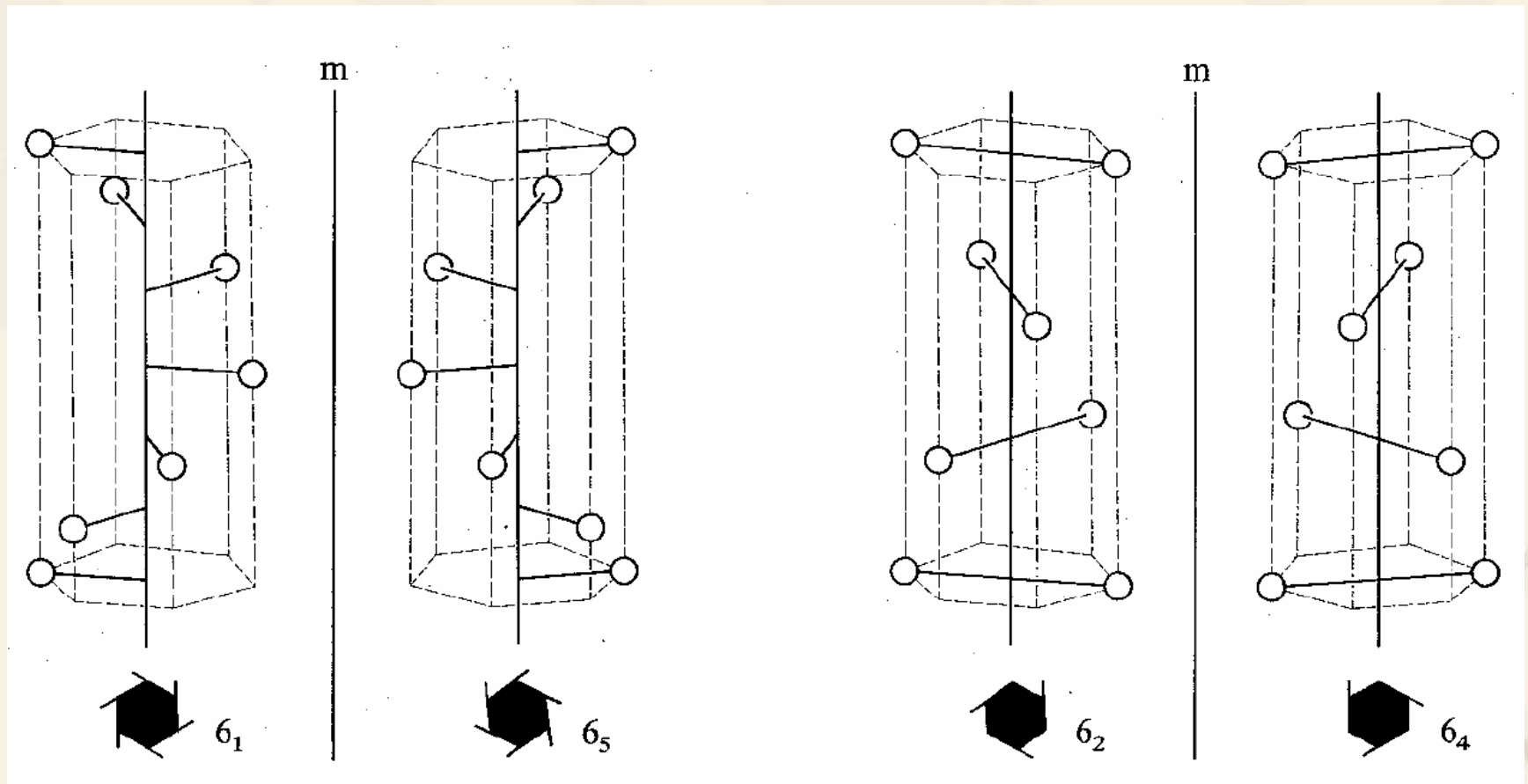
4_2



4_3



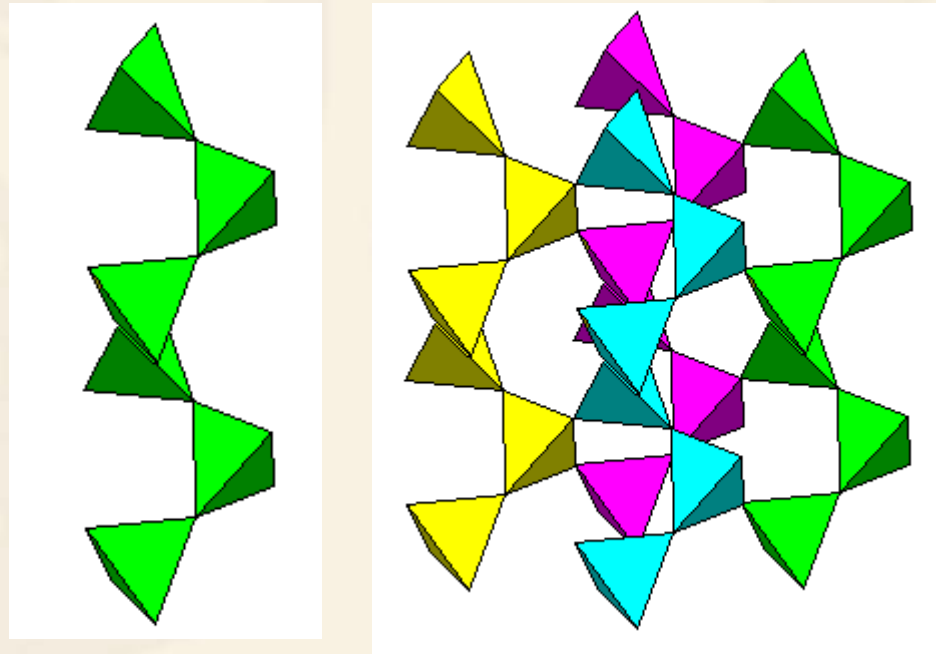
螺旋轴 6_1 , 6_2 , 6_3 , 6_4



石英结构中的六次螺旋轴

石英的基本结构可以看成是硅氧四面体在三和六次螺旋轴附近的螺旋链。在如下左边其中一个三倍螺旋，右方显示的是螺旋连接构成晶体框架。

[www.uwgb.edu/
dutchs/PETROLOGY/QuartzStruc.
HTM](http://www.uwgb.edu/dutchs/PETROLOGY/QuartzStruc.HTM)



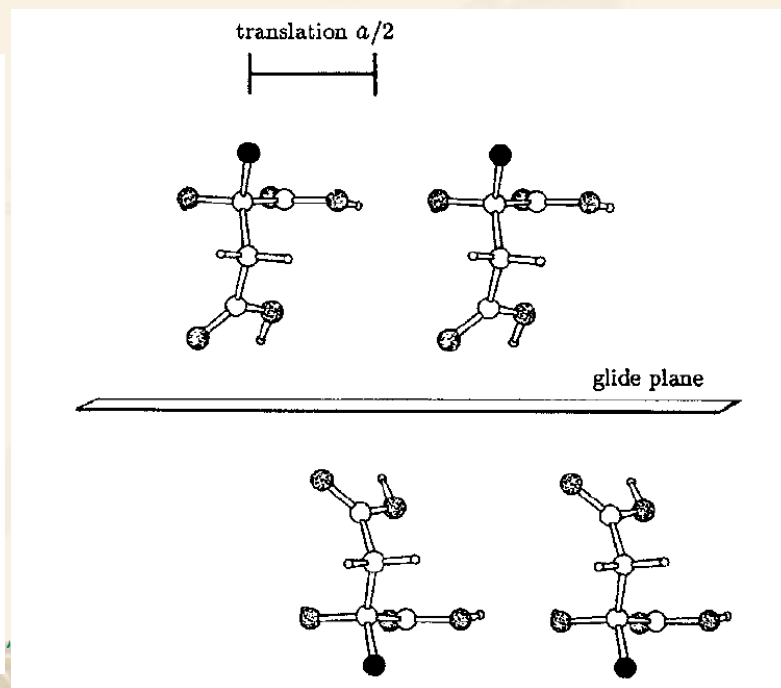
滑移面

- ❖ **滑移反映面**，(滑移面)简称滑移面，其对称操作是沿滑移面进行镜面反映操作，然后接着进行与平行于滑移面的一个方向的平移，平移的大小与方向等于滑移矢量。
- ❖ 点阵的周期性要求重复两次滑移反映后产生的新位置与起始位置相差一个点阵周期，所以滑移面的平移量等于该方向点阵平移周期的一半。

滑移反射

不对称单位先经镜面反射，然后沿平行与镜面的方向平移。

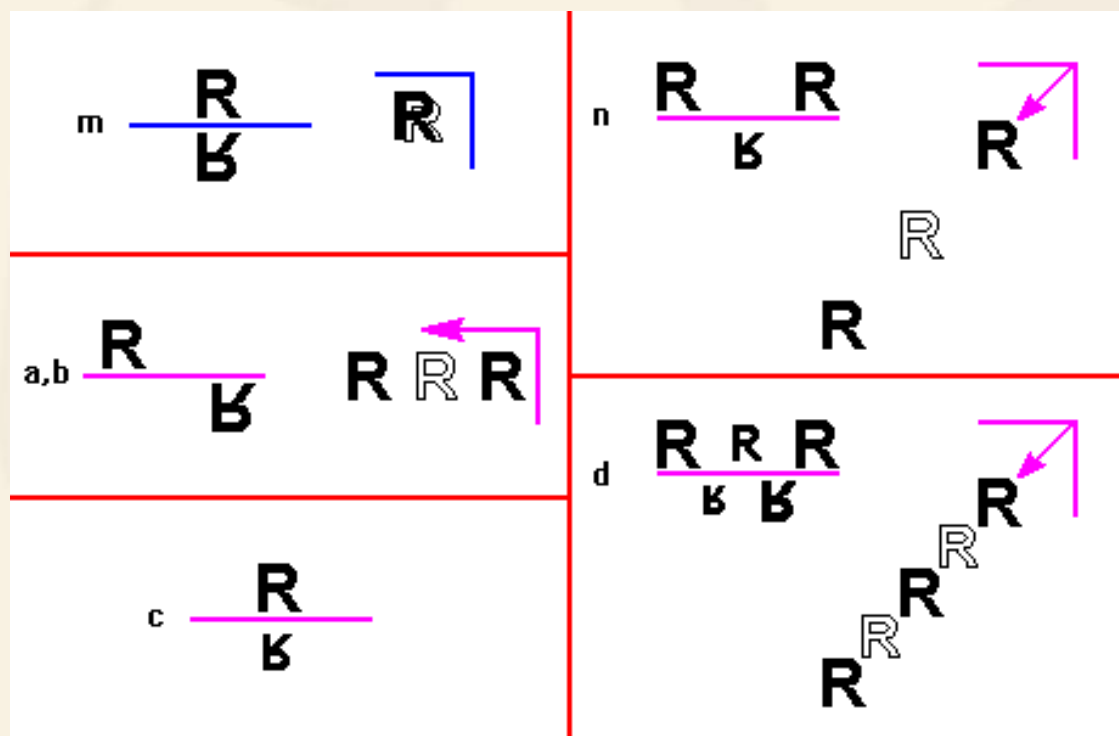
滑移反射改变了不对称单位的手性。



滑移面分类

- ❖ 轴向滑移面：沿晶轴(a、b, c)方向滑移；
- ❖ 对角滑移面：沿晶胞面对角线或体对角线方向滑移，平移分量为对角线一半；
- ❖ 金刚石滑移面：沿晶胞面对角线或体对角线方向滑移，平移分量对角线1/4的对角滑移面。只有在体心或面心点阵中出现，这时有关对角线的中点也有一个阵点，所以平移分量仍然是滑移方向点阵平移点阵周期的一半。

镜面和滑移面



镜面或滑移面的符号。(在左边：沿镜面的边缘看。在右边是沿垂直于镜面的方向观看。箭头表示平移方向。

a, b, c是平行于单胞边的滑移。

n是对角滑移，在两个方向都滑移单胞长度的一半。

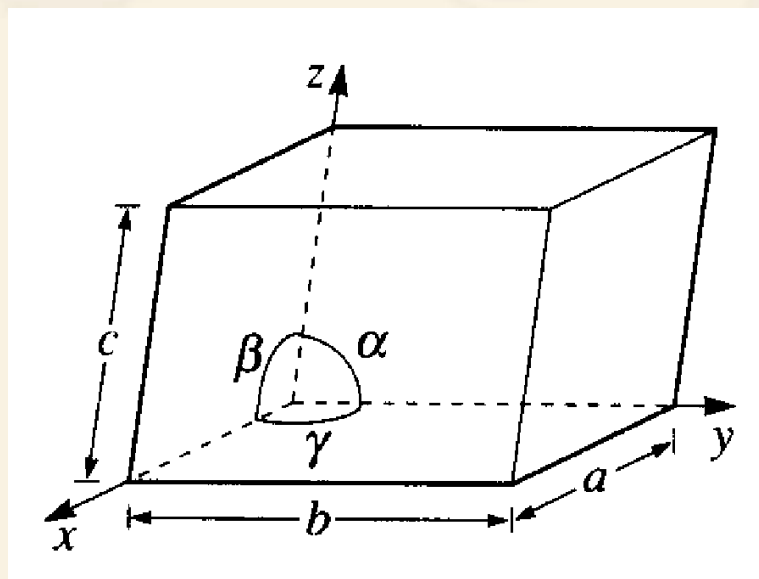
d是类似n的对角滑移，但这里在每个方向移动单胞边长的1/4。

对称操作分类

- ❖ 只产生可重合物体的操作统称为**第一类操作**；而产生生物体对映体（镜像）的操作统称为**第二类操作**。
- ❖ **第一类操作：真（纯）旋转；螺旋旋转。**
- ❖ **第二类操作：反射；反演；滑移；非真旋转（旋转反演，旋转反映）**
- ❖ 没有反轴对称性的晶体是手性晶体。

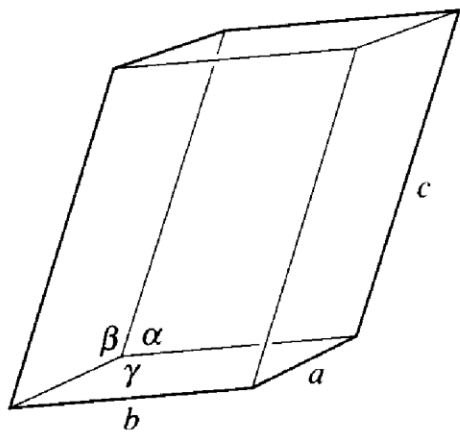
晶系 (The seven crystal systems)

晶系：按照晶胞的特征对称元素可以分成7个不同类型，称为晶系。

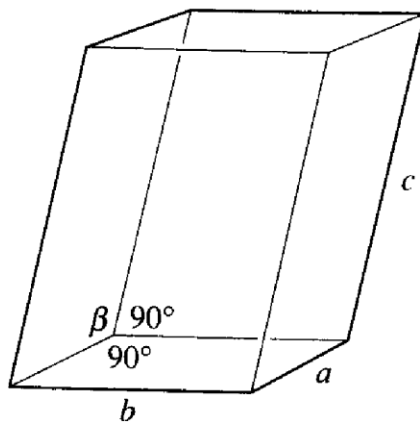


晶系	特征对称元素
三斜	无或反演中心
单斜	唯一的 2 次轴或镜面
正交	三个相互垂直的 2 次旋转轴或反轴。
三方	唯一的 3 次旋转轴或反轴。
四方	唯一的 4 次旋转轴或反轴。
六方	唯一的 6 次旋转轴或反轴。
立方	沿晶胞体对角线的四个 3 次旋转轴或反轴

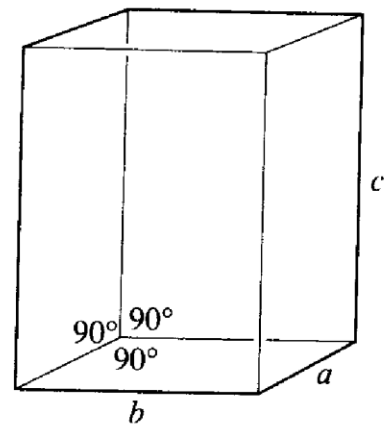
7个晶系的单胞



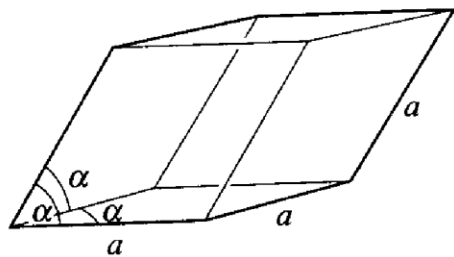
triclinic



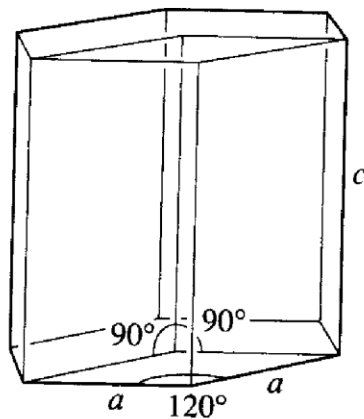
monoclinic



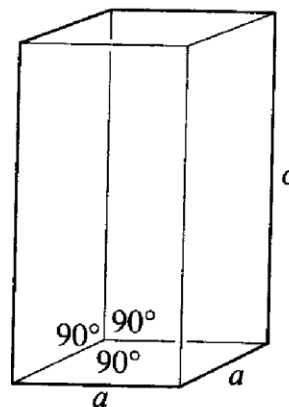
orthorhombic



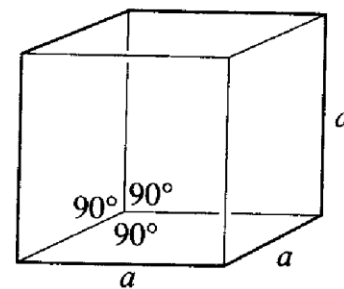
trigonal



hexagonal



tetragonal



cubic

不同晶系中的标准单胞选择规则

晶系	标准单胞选择	变通单胞选择
三斜	晶轴间交角尽可能接近直角，但 $\neq 90^\circ$ 。	容许轴间交角 $\leq 90^\circ$
单斜	Y轴平行于唯一的二次轴或垂直于镜面， β 角尽可能接近直角。	同标准选择，但Z轴代替Y轴， γ 角代替 β 角。
正交	晶轴选择平行于三个相互垂直的2次轴（或垂直于镜面）。	无
四方	Z轴总是平行于唯一的4次旋转（反演）轴，X和Y轴相互垂直，并都与Z轴成直角。	无
六方/三方	Z轴总是平行于唯一的3次或6次旋转（反演）轴，X和Y轴都垂直于Z轴，并相互间交角为 120° 。	在三方晶系，三次轴选为初基单胞的对角线，则 $a=b=c, \alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$ 。
立方	晶轴总选为平行于三个相互垂直的2次轴或4次轴，而四个三次轴平行于立方晶胞的体对角线。	无

群的定义

假设G是由一些元素组成的集合，即 $G = \{\dots, g, \dots\}$ 。在G中定义了一种二元合成规则(操作、运算，群的乘法)。如果G对这种合成规则满足以下四个条件：

a)封闭性：G中任意两个元素的乘积仍然属于G。

$$\forall f, g \in G \Rightarrow fg = h \in G$$

b)结合律： $\forall f, g, h \in G \Rightarrow (fg)h = f(gh)$

c)单位元素。集合G中存在一个单位元素e，对任意元素， $f \in G$ 有

$$ef = fe = f$$

d)可逆性。对任意元素 $f \in G$ ，存在逆元素 $f^{-1} \in G$ ，使 $f^{-1}f = ff^{-1} = e$

则称集合G为一个群。

晶体学点群

- ❖ 晶体中满足群的性质定义的点对称操作的集合称作晶体学点群。点对称操作的共同特征是进行操作后物体中至少有一个点是不动的。
- ❖ 晶体学中，**点对称操作**只能有轴次为1,2,3,4,6的旋转轴和反轴。（对称中心= $\bar{1}$ ， 镜面= $\bar{2}$ ）
- ❖ 如果把点对称操作元素通过一个公共的点按所有可能组合起来，则一共可以得出32种不同的组合方式，称为32个晶体学点群。

32个点群

- ✚ 点群是至少保留一点不动的对称操作群。
- ❖ 点群→晶体+非晶体
- ❖ 32个晶体学点群是满足“晶体制约”的**点群**。

32晶类的推演

http://metafysica.nl/derivation_32.html

晶体学点群的对称元素方向及国际符号

晶系	第一位		第二位		第三位		点群
	可能对称元素	方向	可能对称元素	方向	可能对称元素	方向	
三斜	$1, \bar{1}$	任意	无		无		$1, \bar{1}$
单斜	$2, m, 2/m$	Y	无		无		$2, m, 2/m$
正交	$2, m$	X	$2, m$	Y	$2, m$	Z	$222, mm2, mmm$
四方	$4, \bar{4}, 4/m$	Z	无, $2, m$	X	无, $2, m$	底对角线	$4, \bar{4}, 4/m, 422, 4mm, \bar{4}2m, 4/mmm$
三方	$3, \bar{3}$	Z	无, $2, m$	X	无		$3, \bar{3}, 32, 3m, \bar{3}m$
六方	$6, \bar{6}, 6/m$	Z	无, $2, m$	X	无, $2, m$	底对角线	$6, \bar{6}, 6/m, 622, 6mm, \bar{6}2m, 6/mmm$
立方	$2, m, 4, \bar{4}$	X	$3, \bar{3}$	体对角线	无, $2, m$	面对角线	$23, m\bar{3}, 432, \bar{4}3m, m\bar{3}m$

点群的Schönflies符号

C_n : 具有一个n次旋转轴的点群。

C_{nh} : 具有一个n次旋转轴和一个垂直于该轴的镜面的点群。

C_{nv} : 具有一个n次旋转轴和n个通过该轴的镜面的点群。

D_n : 具有一个n次旋转主轴和n个垂直该轴的二次轴的点群。

S_n : 具有一个n次反轴的点群。

T : 具有4个3次轴和4个2次轴的正四面体点群。

O : 具有3个4次轴,4个3次轴和6个2次轴的八面体点群。

32种点群的表示符号及性质

1. 旋转轴(C=cyclic) :

C_1, C_2, C_3, C_4, C_6 ; 1, 2, 3, 4, 6

2. 旋转轴加上垂直于该轴的对称平面 :

$C_{1h}=C_s, C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}, C_{6h}$; $m, 2/m, 3/m (\bar{6}), 4/m, 6/m$

3. 旋转轴加通过该轴的镜面:

$C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v}$; $mm2, 3m, 4mm, 6mm$

4. 旋转反演轴

$S_2 = C_i, S_4, S_6 = C_{3d}$; $\bar{1}, \bar{4}, \bar{3}$.

32种点群的符号表示符号及性质

5. 旋转轴(n)加n个垂直于该轴的二次轴：

D_2, D_3, D_4, D_6 ; 222, 32, 422, 622

6. 旋转轴(n)加n个垂直于该轴的二次轴和镜面：

$D_{2h}, D_{3h}, D_{4h}, D_{6h}$; mmm, $\bar{6}m2$, 4/mm, 6/mmm

7. D群附加对角竖直平面： D_{2d}, D_{3d} ; $\bar{4}2m, \bar{3}m$

8. 立方体群(T=tetrahedral, O=octahedral)

T, T_h , O, T_d , O_h ; 23, m3, 432, $\bar{4}3m$, m3m

Number	Schönflies Symbol	Crystallographic Symbol	Crystal System
1	C_1	$\bar{1}$	Triclinic
2	C_i	$\bar{1}$	
3	C_s	m	Monoclinic
4	C_2	2	
5	C_{2h}	$2/m$	
6	C_{2v}	mm	Orthorhombic
7	D_2	222	
8	D_{2h}	mmm	
9	C_4	4	Tetragonal
10	S_4	$\bar{4}$	
11	C_{4h}	$4/m$	
12	C_{4v}	$4mm$	
13	D_{2d}	$\bar{4}2m$	
14	D_4	422	
15	D_{4h}	$4/mmm$	Trigonal— Hexagonal
16	C_3	3	
17	S_6	$\bar{3}$	
18	C_{3v}	$3m$	
19	D_3	32	
20	D_{3d}	$\bar{3}m$	
21	C_{3h}	$\bar{6}$	
22	C_6	6	
23	C_{6h}	$6/m$	
24	D_{3h}	$\bar{6}m2$	
25	C_{6v}	$6mm$	
26	D_6	622	
27	D_{6h}	$6/mmm$	Cubic
28	T	23	
29	T_h	$m\bar{3}$	
30	T_d	$\bar{4}3m$	
31	O	432	
32	O_h	$m\bar{3}m$	

晶体点群的 Schönflies和国际 符号

点群与物理性质

从晶体的点群对称性，可以判明晶体有无对映体、旋光性、压电效应、热电效应、倍频效应等。

1. **旋光性**出现在15种不含对称中心的点群。
2. **热电性**出现在10种只含一个极性轴的点群。
3. **压电性**出现在20种不含对称中心的点群(432除外)。
4. **倍频效应**出现在18种不含对称中心的点群。

反过来，在晶体结构分析中，可以借助物理性质的测量结果判定晶体是否具有对称中心。

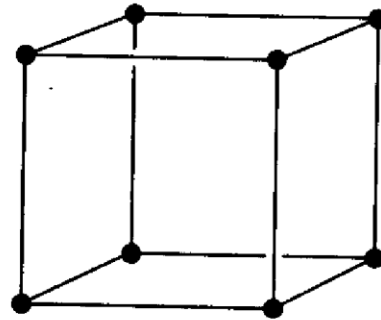
点阵带心

在单胞之内附加点阵点位置
由一套带心操作描述：

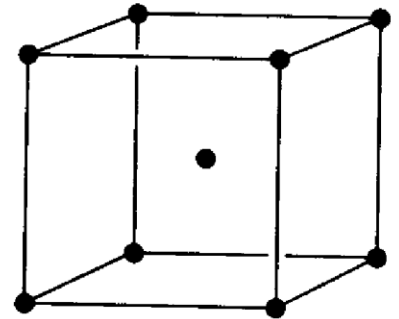
体心(I)：在 $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ 附加的点
阵点；

面心(F)：在 $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ 、 $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$
和 $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$ 有附加的点阵点；

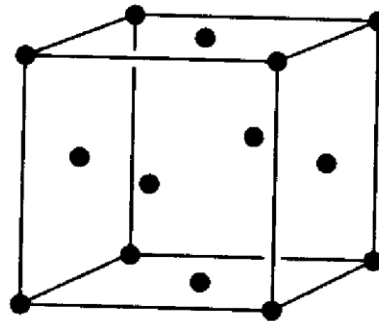
面心(C)：在 $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$ 有附加的
点阵点



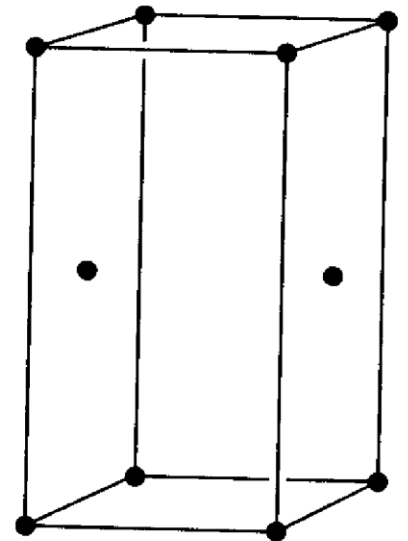
primitive (P)



body-centred (I)



face-centred (F)



face-centred A (B or C)

带心操作

带心类型	符号	带心矢量(s)	每单胞阵点数
面心	F	$\frac{1}{2} \mathbf{a} + \frac{1}{2} \mathbf{b}$ $\frac{1}{2} \mathbf{a} + \frac{1}{2} \mathbf{c}$ $\frac{1}{2} \mathbf{b} + \frac{1}{2} \mathbf{c}$	4
体心	I	$\frac{1}{2} \mathbf{a} + \frac{1}{2} \mathbf{b} + \frac{1}{2} \mathbf{c}$	2
底心（侧面心）	C	$\frac{1}{2} \mathbf{a} + \frac{1}{2} \mathbf{b}$	2
	B	$\frac{1}{2} \mathbf{a} + \frac{1}{2} \mathbf{c}$	
	A	$\frac{1}{2} \mathbf{b} + \frac{1}{2} \mathbf{c}$	

带心

不是所有七个晶系都可能带心—仅有14个可能的组合(Bravais点阵)

一些带心的类型不允许，因为他们将降低单胞的对称性：

如立方晶系不可能有底心点阵，因为这将破坏立方对称的一个基本条件：有三次对称轴。

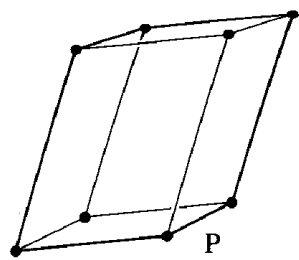
一些带心的类型是多余的：

如C心的四方点阵总可以用一个更小的初基四方单胞来描述。

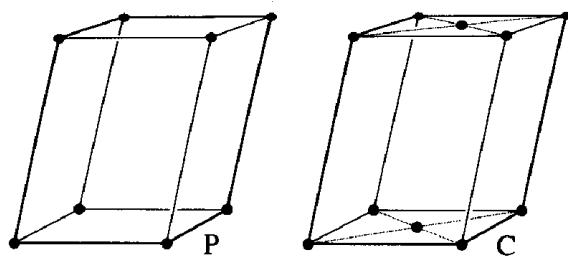
空间点阵型式—布拉伐点阵

- ❖ 空间点阵按点群对称性和带心的模式一共可以产生14种型式，称为14种布拉伐点阵或布拉伐点阵。布拉伐点阵表示出所属空间群的平移子群。
- ❖ Bravais点阵→描述点阵的纯平移对称。实质上通过指定Bravais点阵，指定了单胞(晶系)的形状和带心的型式。

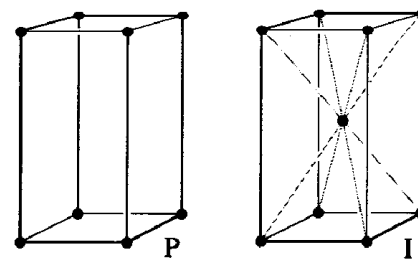
14种空间点阵型式示意图(14个Bravais点阵)



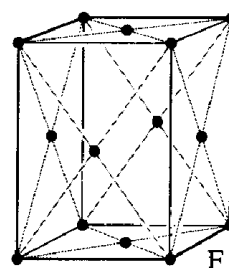
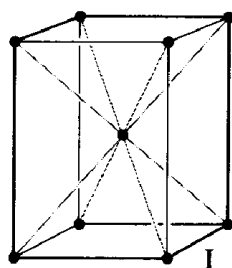
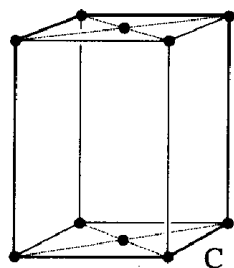
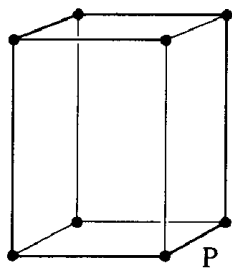
triclinic



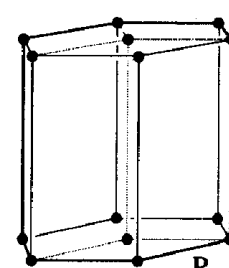
monoclinic



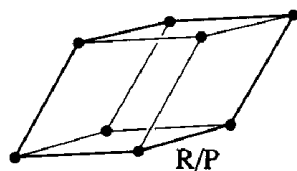
tetragonal



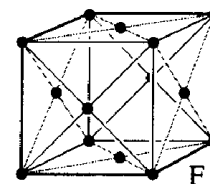
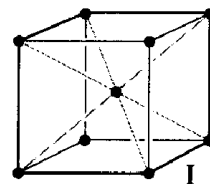
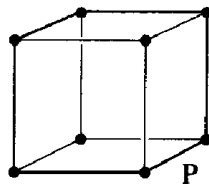
orthorhombic



hexagonal



trigonal



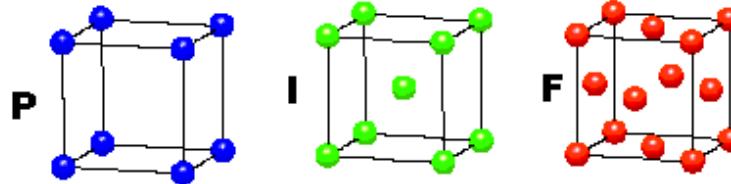
cubic

14种可能的Bravais点阵

CUBIC

$$a = b = c$$

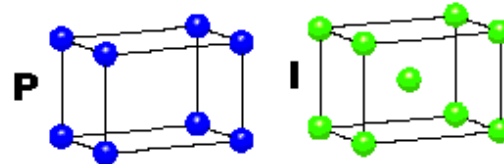
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$

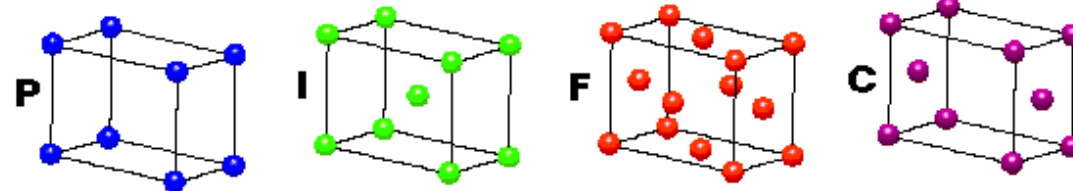
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

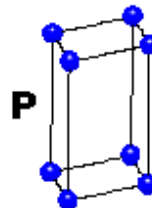


HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

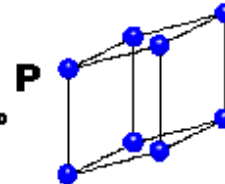
$$\gamma = 120^\circ$$



TRIGONAL

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

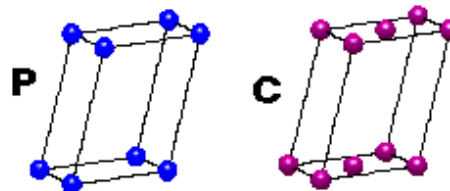


MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

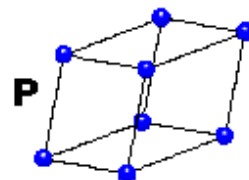
$$\beta \neq 120^\circ$$



TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



4 Types of Unit Cell

P = Primitive

I = Body-Centred

F = Face-Centred

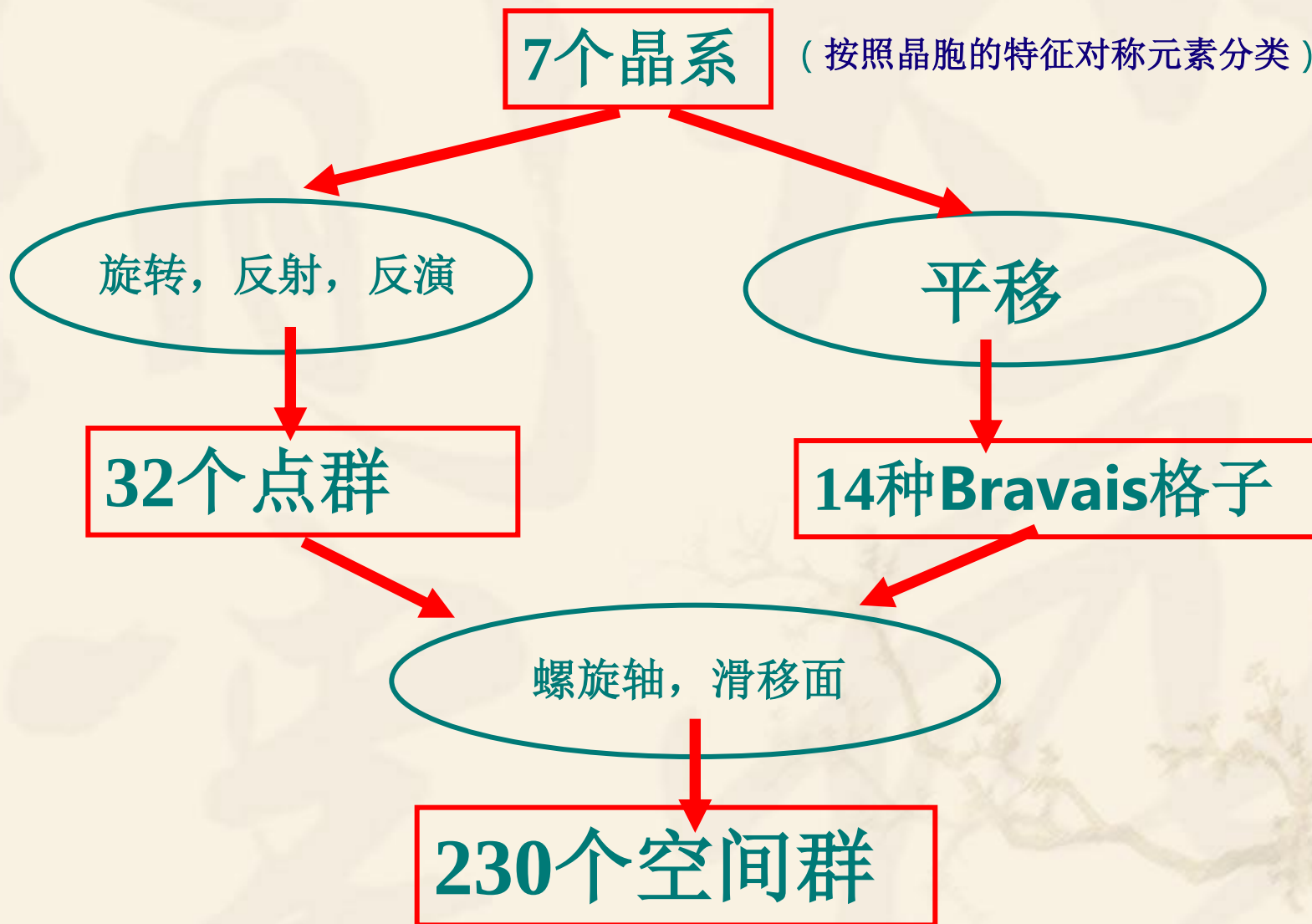
C = Side-Centred

+

7 Crystal Classes

→ 14 Bravais Lattices

从晶系到空间群



空间群 (Space Group)

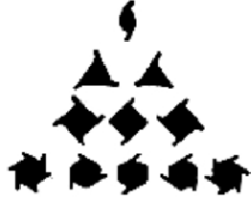
- ❖ 晶体学中的空间群是三维周期性物体(晶体)变换成它自身的对称操作(平移, 点操作以及这两者的组合)的集合。一共有230种空间群。
- ❖ 空间群是点阵、平移群(滑移面和螺旋轴)和点群的组合。230个空间群是由14个Bravais点阵与32个晶体点群系统组合而成。

参见：<http://asdp.bio.bnl.gov/asda/Libraries/sgtable.html>

空间群分布

- ❖ 三斜晶系：2个；单斜晶系：13个
- ❖ 正交晶系：59个；三方晶系：25
- ❖ 四方晶系：68个；六方晶系：27个
- ❖ 立方晶系：36个。
- ❖ 有对称中心90个，无对称中心140个。
- ❖ 73 个 symmorphic (点式) ， 157个 non-symmorphic。

空间群对称元素的标准符号

Element	Symbol	$\perp$ to Projection Plane	In or $\parallel$ to Projection Plane
Simple mirror	m	—	 or 
Axial glide	$a, b, c,$	(glide in projection plane) (glide $\perp$ to projection plane)	 or  or 
Diagonal glide	n	-----	
Diamond glide	d	$\vdash \leftrightsquigarrow \vdash$	
Center of inversion	$\bar{1}$		
Rotation axis	2, 3, 4, 6		
Rotation-inversion axis	$\bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$		
Screw axis	2_1 $3_1, 3_2$ $4_1, 4_2, 4_3$ $6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$		

对称元素的图示和印刷符号 (1)

Symmetry axis or symmetry point	Graphical symbol [†]	Screw vector of a right-handed screw rotation in units of the shortest lattice translation vector parallel to the axis	Printed symbol (subelements in parentheses)
Identity	None	None	1
Twofold rotation axis } Twofold rotation point } (two dimensions)		None	2
Twofold screw axis: '2 sub 1'		$\frac{1}{2}$	2_1
Threefold rotation axis } Threefold rotation point } (two dimensions)		None	3
Threefold screw axis: '3 sub 1'		$\frac{1}{3}$	3_1
Threefold screw axis: '3 sub 2'		$\frac{2}{3}$	3_2
Fourfold rotation axis } Fourfold rotation point } (two dimensions)	 	None	4 (2)
Fourfold screw axis: '4 sub 1'	 	$\frac{1}{4}$	$4_1 (2_1)$
Fourfold screw axis: '4 sub 2'	 	$\frac{1}{2}$	$4_2 (2)$
Fourfold screw axis: '4 sub 3'	 	$\frac{3}{4}$	$4_3 (2_1)$
Sixfold rotation axis } Sixfold rotation point } (two dimensions)		None	6 (3,2)
			

对称元素的图示和印刷符号 (2)

Sixfold screw axis: '6 sub 1'		$\frac{1}{6}$	$6_1 (3_1, 2_1)$
Sixfold screw axis: '6 sub 2'		$\frac{1}{3}$	$6_2 (3_2, 2)$
Sixfold screw axis: '6 sub 3'		$\frac{1}{2}$	$6_3 (3, 2_1)$
Sixfold screw axis: '6 sub 4'		$\frac{2}{3}$	$6_4 (3_1, 2)$
Sixfold screw axis: '6 sub 5'		$\frac{5}{6}$	$6_5 (3_2, 2_1)$
Centre of symmetry, inversion centre: '1 bar'		None	$\bar{1}$
Reflection point, mirror point (one dimension)			
Inversion axis: '3 bar'		None	$\bar{3} (3, \bar{1})$
Inversion axis: '4 bar'		None	$\bar{4} (2)$
Inversion axis: '6 bar'		None	$\bar{6} \equiv 3/m$
Twofold rotation axis with centre of symmetry		None	$2/m (\bar{1})$
Twofold screw axis with centre of symmetry		$\frac{1}{2}$	$2_1/m (\bar{1})$
Fourfold rotation axis with centre of symmetry		None	$4/m (\bar{4}, 2, \bar{1})$
'4 sub 2' screw axis with centre of symmetry		$\frac{1}{2}$	$4_2/m (\bar{4}, 2, \bar{1})$
Sixfold rotation axis with centre of symmetry		None	$6/m (\bar{6}, \bar{3}, 3, 2, \bar{1})$
'6 sub 3' screw axis with centre of symmetry		$\frac{1}{2}$	$6_3/m (\bar{6}, \bar{3}, 3, 2, \bar{1})$

了解Herman-Mauguin空间群符号

- ❖ 空间群是经常用简略Herman-Mauguin符号(即 $Pnma$ 、 $I4/mmm$ 等)来指定。在简略符号中包含能产生所有其余对称元素所必需的最少对称元素。
- ❖ 从简略H-M符号，我们可以确定晶系、Bravais点阵、点群和某些对称元素的存在和取向（反之亦然）。

空间群符号 $LS_1S_2S_3$

- ❖ 运用以下规则，可以从对称元素获得H-M空间群符号。
- 1. 第一字母(L)是点阵描述符号，指明点阵带心类型： P , I , F , C , A , B 。
- 2. 其于三个符号($S_1S_2S_3$)表示在特定方向（对每种晶系分别规定）上的对称元素。
- 3. 如果没有二义性可能，常用符号的省略形式 (如 Pm ，而不用写成 $P1m1$)。
- * 由于不同的晶轴选择和标记，同一个空间群可能有几种不同的符号。如 $P21/c$,如滑移面选为在 a 方向，符号为 $P21/a$;如滑移面选为对角滑移，符号为 $P21/n$ 。

对称方向

晶系	对称方向		
	第一	第二	第三
三斜	无		
单斜	$b [010]$		
正交	$a [100]$	$b [010]$	$c [001]$
四方	$c [001]$	$a [100]/[010]$	$a+b [110]$
六方	$c [001]$	$a [100]/[010]$	$2a+b [120]$
三方 (R)	$a+b+c [111]$	$a-b [1 \bar{1} 0]$	
立方	$a [100]/[010]/[001]$	$a+b+c [111]$	$a+b [110]$

X-射线结晶学国际表 (1)

提供的信息的是：

1. 空间群的国际符号为

2. Schoenflies符号

3. 晶系

4. 晶类

5. 一般等效点图： 单胞的投影，包含所有等效点位置。“+”表示 $z > 0$ ，“-”表示 $z < 0$ ；“，”表示点“被翻转”（镜面操作或反演）。

X-射线结晶学国际表 (2)

6. 对称图： 单胞的对称元素

7. 点位置(首先一般等效点，然后特殊点)：

多重性(等效点的个数)

“Wyckoff记号 “

在该位置的点对称性 (site symmetry)

点的坐标

8.出现衍射的条件

9-12： (略)

从空间群符号辨认晶系

1. 立方-第2个对称符号: 3 或 $\bar{3}$ (如: $Ia3$, $Pm3m$, $Fd3m$)
2. 四方-第1个对称符号: 4 , $\bar{4}$, 4_1 , 4_2 或 4_3 (如: $P4_12_12$, $I4/m$, $P4/mcc$)
3. 六方-第1个对称符号: 6 , $\bar{6}$, 6_1 , 6_2 , 6_3 , 6_4 或 6_5 (如: $P6mm$, $P6_3/mcm$)
4. 三方-第1个对称符号: 3 , $\bar{3}$, 3_1 或 3_2 (如: $P31m$, $R3$, $R3c$, $P312$)
5. 正交-点阵符号后的全部三个符号是镜面, 滑移面, 2次旋转轴或2次螺旋轴 (即 $Pnma$, $Cmc2_1$, $Pnc2$)
6. 单斜-点阵符号后有唯一的镜面、滑移面、2次旋转或者螺旋轴, 或者轴/平面符号 (即 $Cc\bar{1}$, $P2$, $P21/n$)。
7. 三斜-点阵符号后是 1 或 (-1) 。

从空间群符号确定点群

❖ 点群可以从简略H-M符号通过下列变换得出：

- 1.把所有滑移面全部转换成镜面；
- 2.把所有螺旋轴全部转换成旋转轴。

例如：

❖ 空间群 = $Pnma$ $\rightarrow$ 点群 = mmm

空间群 = $I \bar{4}c2$ $\rightarrow$ 点群 = $\bar{4}m2$

空间群 = $P4_2/n$ $\rightarrow$ 点群 = $4/m$

国际表中的空间群 $P2_1/c$

$P2_1/c$

C_{2h}^5

$2/m$

Monoclinic

CONTINUED

No. 14

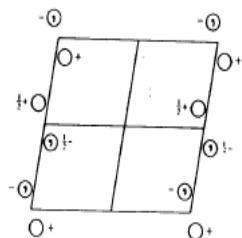
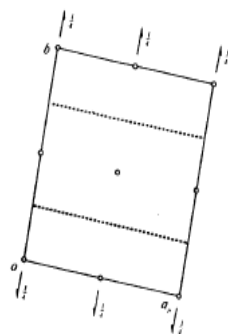
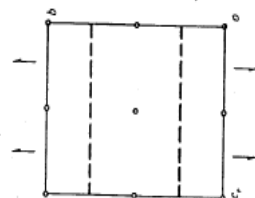
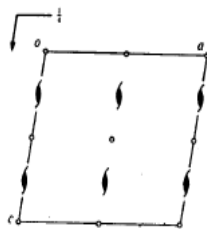
$P2_1/c$

No. 14

$P12_1/c1$

Patterson symmetry $P12_1/m1$

UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 1



Origin at $\bar{1}$

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

Symmetry operations

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

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

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

4 e 1 (1) x, y, z (2) $x, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (3) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ (4) $x, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$

Reflection conditions

General:

$h0l: l = 2n$

$0k0: k = 2n$

$00l: l = 2n$

Special: as above, plus

$hkl: k + l = 2n$

$hkl: k + l = 2n$

$hkl: k + l = 2n$

$hkl: k + l = 2n$

2 d $\bar{1}$ $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

2 c $\bar{1}$ $0, 0, \frac{1}{2}$ $0, \frac{1}{2}, 0$

2 b $\bar{1}$ $\frac{1}{2}, 0, 0$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

2 a $\bar{1}$ $0, 0, 0$ $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Symmetry of special projections

Along $[001]$ $p2gm$

$a' = a_p$ $b' = b$

Origin at $0, 0, z$

Along $[100]$ $p2gg$

$a' = b$ $b' = c_p$

Origin at $x, 0, 0$

Along $[010]$ $p2$

$a' = \frac{1}{2}c$ $b' = a$

Origin at $0, y, 0$

Maximal non-isomorphic subgroups

I $[2]P12_11(P2_1)$ 1; 2

$[2]P\bar{1}$ 1; 3

$[2]P1c1(Pc)$ 1; 4

IIa none

IIb none

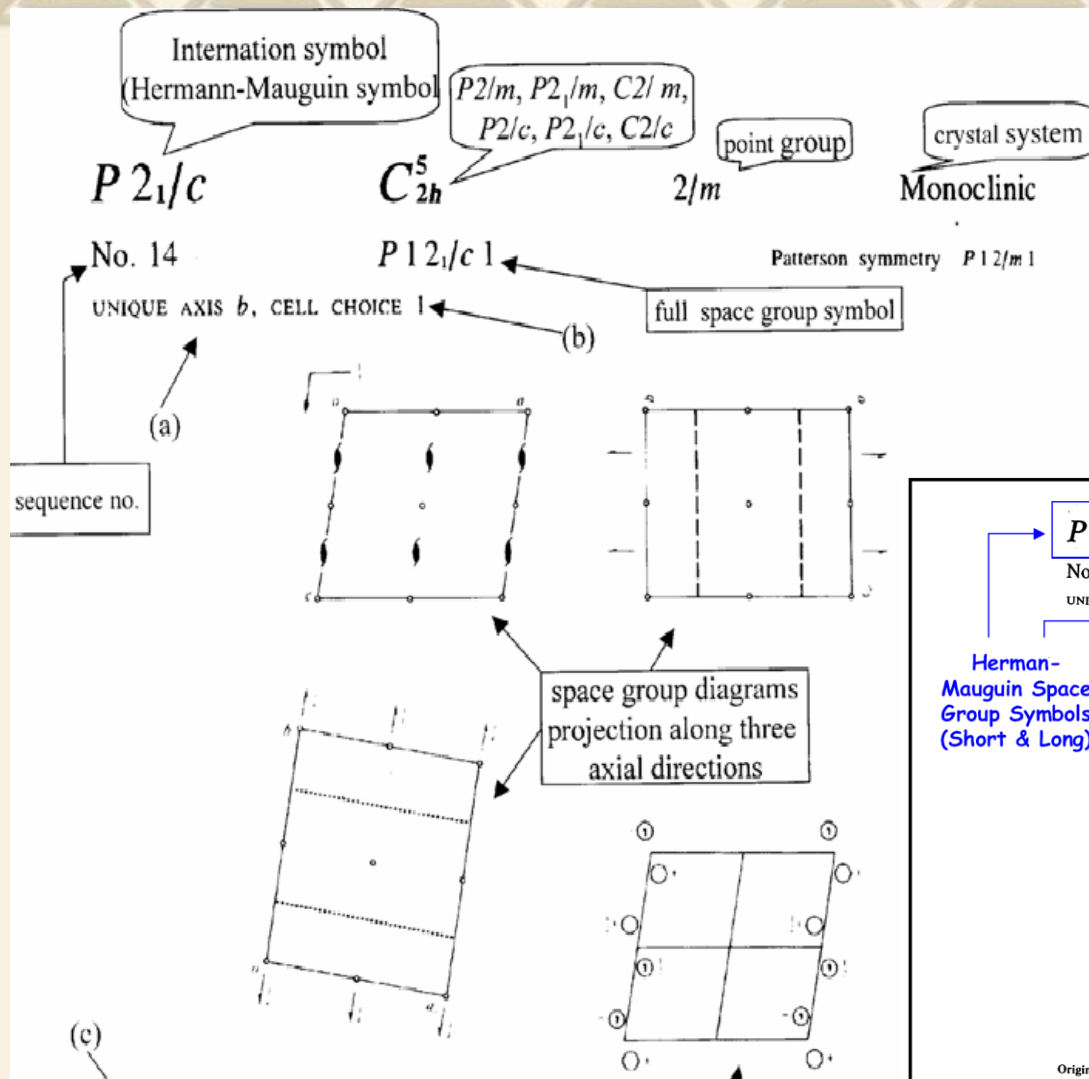
Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc $[3]P12_1/c1(b' = 3b)(P2_1/c)$; $[2]P12_1/c1(a' = 2a \text{ or } a' = 2a, c' = 2a + c)(P2_1/c)$

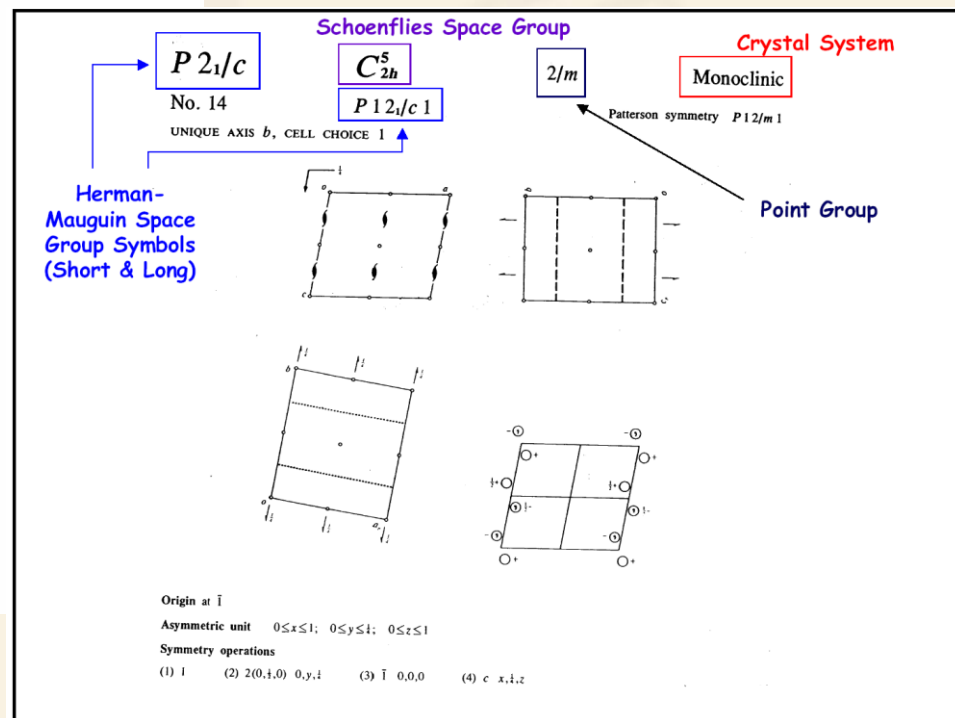
Minimal non-isomorphic supergroups

I $[2]Pnna$; $[2]Pmna$; $[2]Pcca$; $[2]Pbam$; $[2]Pccn$; $[2]Pbcm$; $[2]Pnmm$; $[2]Pbcn$; $[2]Pbca$; $[2]Pnma$; $[2]Cmca$

II $[2]C12/c1(C2/c)$; $[2]A12/m1(C2/m)$; $[2]I12/c1(C2/c)$; $[2]P12_1/m1(2c' = c)(P2_1/m)$; $[2]P12/c1(2b' = b)(P2/c)$



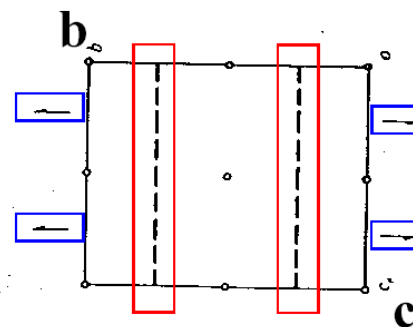
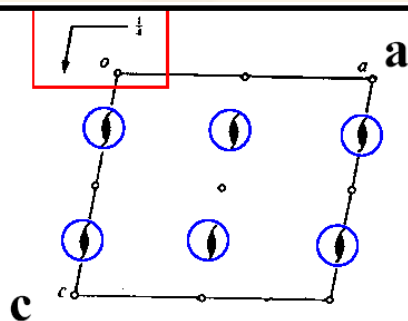
$P2_1/c$



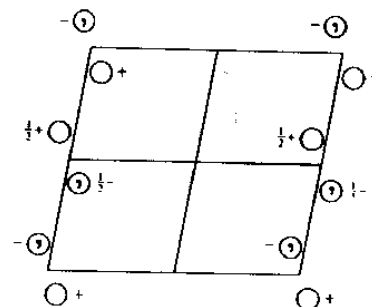
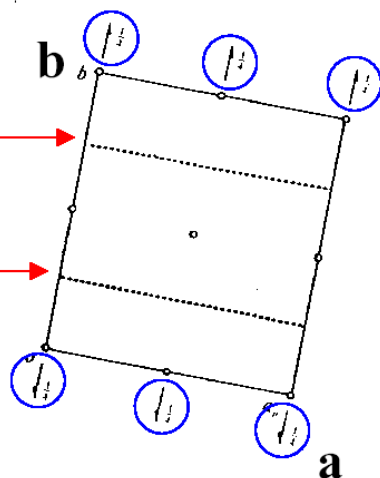
P2₁/c的图示

P 1 2₁/c 1

Axes parallel to or
planes perpendicular
to the b-axis



Glide translation
perpendicular to
the plane of the
projection



Origin at $\bar{1}$

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

Symmetry operations

(1) 1

(2) $2(0, \frac{1}{2}, 0) 0, y, z$

(3) $\bar{1} 0, 0, 0$

(4) $c x, \frac{1}{2}, z$

Inversion
Center

c-glide plane

2₁ Screw Axis

等效点系

- ❖ 晶胞中对称元素按照一定的方式排布。在晶胞中某个坐标点有一个原子时，由于对称性的要求，必然在另外一些坐标点也要有相同的原子。这些由对称性联系起来，彼此对称等效的点，称为等效点系。
- ❖ 等效点系在空间群表中表示为Wyckoff位置。

Wyckoff位置 (1)

在国际表中包含的一个最有用的信息是Wyckoff位置。

Wyckoff位置告诉我们在晶体中何处可以找到原子。

比如：单斜空间群 Pm 仅有垂直于 b 轴的二个镜面。一个在 $y = 0$ ，另一个在 $y = \frac{1}{2}$ 位置。

通过镜面操作，在 x, y, z 的原子 $\rightarrow$ 在 $x, -y, z$ 第二个原子。如果我们安置原子在其中一个镜面(它的 y 坐标将是0或 $\frac{1}{2}$)，镜面反射操作就不会产生第二个原子。

Wyckoff位置 (2)

- ❖ 多重性 (**multiplicity**) : 告诉我们如果安置一个特定原子在该位置, 经过空间群的所有对称操作, 总共会产生多少个原子。
- ❖ 记号 (**letter**) 是从高对称性位置开始按英文字母顺序指定的位置标记。
- ❖ 对称 (**symmetry**) 告诉我们原子所在之处具有的对称元素。

P_m空间群的 Wyckoff位置

多重性	Wyckoff记号	点对称	坐标
2	c	1	(1) x, y, z (2) $x, -y, z$
1	b	m	$x, \frac{1}{2}, z$
1	a	m	$x, 0, z$

在晶体结构描述中，经常把多重性和Wyckoff记号结合在一起作为等效位置的名称。如把P_m空间群中的等效点位置称为**1a, 1b, 2c** 等。

一般位置-特殊位置

一般位置：空间群表里最先列出的Wyckoff位置，

1. 不处在任何一个对称元素上的位置；
2. 一般位置具有最高多重性（ M ）。初级晶胞中 M 等于点群的对称操作总数；带心晶胞 M 等于点群的阶数乘以晶胞中的阵点数。
3. 在一般位置的原子总具有三个位置自由度，它的三个分数坐标都可以独立变化。

特殊位置：所有不在一般位置的。

1. 处于一个或多个对称元素上的位置；
2. 其多重性是一般位置多重性的公因子，即比一般位置小（一个整数倍）。
3. **特殊位置**的分数坐标中必有一个（或多个）是不变的常数。

不对称单位 (Asymmetric Unit)

为描述结构，只需确定晶胞中每套等效点系中的一个原子的坐标，这套等效点系中的其它原子的位置就可以从空间群对称操作推出。

不对称单位：是当应用全部空间群的对称操作（平移+点对称操作）后可以填充整个空间的最小空间区域。在结晶学里，不对称单位可以包含一个原子或一组原子（或分子）。

结构基元和不对称单位的区别：结构基元和点阵点代表的内容相应，在初基晶胞中，整个晶胞构成一个结构基元；但结构基元（单胞）可以包含几个不对称单位。

不对称单位经过空间群全部对称操作（平移+点对称操作）产生整个空间结构。结构基元只需空间群的平移操作就可以产生整个空间结构。

总结

1. 晶体的平移对称性：三维点阵和晶胞
2. 晶体学中的对称操作元素
3. 晶体学点群，晶系和点阵型式
4. 空间群及其应用：空间群符号，等效点系，分数坐标，不对称单位

参考书和互联网资源

1. “粉末衍射法测定晶体结构” 梁敬魁编著，科学出版社，2003年。
2. “Fundamentals of Powder diffraction and Structural Characterization”，
V.K.Pecharsky, P.Y. Zavalij, Kluwer Academic, 2003
3. “晶体结构测定”，周共度著，科学出版社，1981年。
4. “固体科学中的空间群”，G. 本斯，格莱泽著，高等教育出版社，1984年
5. “对称性原理(一)对称图象的群论原理”，唐有祺著，科学出版社，1984年
6. “Fundamentals of Crystallography”，C. Giacovazzo et al, Oxford Univ. Press, 1992.
7. “X射线晶体学导论”，(英) M.M. Woolfson著，科学出版社，1981年年。
8. “晶体学中的对称群”，王仁卉，郭可信著，科学出版社，1990年。
9. <http://www.cryst.ehu.es/>
10.

谢谢！ 欢迎批评指正

2006/07/23