

现代化学基础丛书·典藏版 29

无机晶体的结构、组成和性质

晶格能、热膨胀、体模量和硬度

张思远◎著



科学出版社

现代化学基础丛书·典藏版 29

无机晶体的结构、组成和性质

——晶格能、热膨胀、体模量和硬度

张思远 著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书详细阐述无机晶体的结构特征,以及晶格能、热膨胀、体模量、硬度等物理量的测量方法和理论计算方法;累计大量晶体物理参数结果,并利用介电化学键理论方法估算多种复杂晶体系列的力学参数和热学参数,为全面了解晶体性质提供基础数据。本书包括基本概念、理论分析、公式推导、数据结果和物理规律,同时还提供一种从结构出发估算晶体力学和热学性能的方法。

本书可供材料科学、理论化学、固体物理和无机化学领域的科研工作者,以及高等学校教师和研究生参考。

图书在版编目 CIP 数据

现代化学基础丛书:典藏版 / 朱清时主编. —北京:科学出版社,2016. 1

ISBN 978-7-03-046874-1

I. ①现… II. ①朱… III. ①化学 IV. O6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 308944 号

责任编辑:杨震 周强 / 责任校对:陈玉凤

责任印制:钱玉芬 / 封面设计:陈敬

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京厚诚则铭印刷科技有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2016 年 1 月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2016 年 1 月第一次印刷 印张:16 3/4

字数:340 000

定价:6000.00 元(全 42 册)

(如有印装质量问题,我社负责调换)



前 言

自然界中,各种化学元素和它们的化合物,在一般状况下通常表现为三种宏观形态,即固态、液态和气态。固态物质也称为固体,它分为晶体和非晶体两类。晶体是组成固体的基本单元(原子、离子、离子集团或者分子)在空间中呈现周期性的有规则的排列,并且延伸到整个晶体,也称为长程有序。非晶体不具有周期性,只有某种近程配位,也叫近程有序。事实上,大多数元素和它们的化合物都具有固体形态,并且多呈现晶体状态。人们很早就注意到晶体具有规则的几何形状,在1885~1890年,俄国科学家费多洛夫、德国科学家熊夫利等研究和发展了晶体微观几何结构的理论体系,逐步完善了晶体的结构特征和对称性规律。1912年,劳厄完成了晶体X射线的衍射实验并导出晶体衍射的劳厄方程,从实验上证明了其理论结论的正确性。此后,随着科学技术的进步又发展了一系列测定和解析晶体结构的方法。目前已经知道,晶体具有7种晶系,14种布拉维点阵或布拉维格子,32种点群,230种空间群结构等。

晶体是一种非常重要的高技术材料,如激光晶体、非线性光学晶体、半导体晶体、磁性晶体和铁电晶体等。大量的研究表明,晶体的性质与晶体的结构和组成有着密切的关系。因此,晶体的结构、组成和性质的研究是固体物理、固体化学、材料科学等研究领域的重要研究课题。长期以来,人们在此领域做了大量的研究工作,现在仍然在继续研究中,但是大多数研究仍然限于从实验探索总结规律,寻找晶体结构、组成和性质之间的联系。例如,具有热电效应的晶体的点群对称性为 $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, C_s, C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v}$;具有压电效应的晶体的点群对称性为没有反演对称中心的点群;具有非零二阶非线性系数的晶体只属于20个点群等定性规律。由微观结构和组成参数直接确定晶体性质的定量关系还十分稀少,它需要建立晶体微观参数和标志晶体物理性质参数间的定量关系,是非常复杂和困难的。

科学研究不仅要了解晶体具有哪方面功能,还要知道这种功能有多大。另外,使用中不仅要了解晶体的特征功能还要了解晶体的其他性质。例如,使用光学晶体时,除了光学功能要好外,也要了解它的机械性能、热学性能等。目前,关于晶体特征性质,如光学、非线性光学,电学,磁学方面的专著较多,对于从结构和组成确定晶体力学性能和热学性能的书籍尚缺少,而这些性质正是晶体通性。特性属于某些晶体,而通性属于每个晶体。本书总结了这一领域的有关知识,科学研究的基本理念、相应的科学规律,以及多年来我们在晶体结构、组成和性质研究中的研

究理论和研究结果,试图从晶体结构、微观参数和晶体中组成元素的化学状态出发,定量估算晶体的性质参数,为新材料的合成和性质预测提供一些理论依据。本书重点研究晶体的晶格能、热膨胀、体模量、硬度等物理参数,包括简单无机晶体和复杂无机晶体的估算方法,以及各类晶体的估算结果。

由于作者学术水平有限,书中不妥之处在所难免,请同行专家多提宝贵意见。

作 者

2011年6月于中国科学院长春应用化学研究所

目 录

前言	
第 1 章 晶体的对称性及其基本概念	1
1.1 晶体的点对称性	1
1.2 对称操作的符号和含义	1
1.3 点群	2
1.4 晶体的晶胞和晶系	3
1.5 布拉维点阵	4
1.6 晶体的平移对称性	5
1.7 晶体的空间群	6
参考文献	11
第 2 章 无机晶体的结构特征和性质	12
2.1 无机晶体的结构分布特征	12
2.1.1 晶体的空间群分布	12
2.1.2 晶体的点群分布	15
2.2 稀土无机晶体的结构分析	17
2.3 晶体的结构和性质关系	33
参考文献	35
第 3 章 无机晶体的晶格能	36
3.1 晶格能的实验方法	36
3.2 晶格能的理论计算方法	37
3.2.1 Born-Lande 方程	38
3.2.2 Born-Mayer 方程	41
3.2.3 全面计算方法	42
3.2.4 Kapustinskii 方程	43
3.2.5 分子体积和晶格能	44
3.3 晶格能的介电化学键理论计算方法	45
3.3.1 晶体化学键的介电理论	45
3.3.2 简单晶体晶格能的计算方法	51
3.3.3 复杂离子晶体晶格能的计算	54
参考文献	60

第 4 章 无机晶体的热膨胀	61
4.1 热膨胀系数的定义	61
4.2 格临爱森系数	62
4.3 热膨胀系数的测定	64
4.3.1 宏观方法	64
4.3.2 微观方法	65
4.4 热膨胀系数的计算方法	65
4.4.1 晶体化学计算方法	65
4.4.2 理论计算方法	74
4.4.3 晶体膨胀系数计算的介电理论方法	81
参考文献	86
第 5 章 晶体的弹性模量	88
5.1 体积弹性模量的定义	88
5.2 体模量的实验测定方法	90
5.2.1 活塞位移法	90
5.2.2 光学干涉法	90
5.2.3 X 射线衍射法	91
5.2.4 冲击波法	91
5.2.5 超声波法	91
5.3 体模量的理论计算方法	92
5.3.1 弹性系数和模量	92
5.3.2 物态方程计算方法	94
5.3.3 晶体化学计算方法	98
5.3.4 晶体结构和化学键参数的计算方法	99
5.3.5 密度泛函理论计算方法	101
5.4 晶体体模量计算的介电方法	104
5.4.1 简单晶体体模量的计算公式	104
5.4.2 LnX ($\text{Ln} = \text{镧系元素}; \text{X} = \text{N, P, As, Sb, Bi}$) 型晶体的体模量	112
5.4.3 复杂晶体体模量的计算公式	116
5.4.4 石榴石型晶体的体模量	120
参考文献	131
第 6 章 晶体的硬度	135
6.1 晶体硬度的测量方法	135
6.1.1 莫氏硬度	135
6.1.2 维氏硬度	135

6.1.3	克氏硬度	136
6.2	晶体硬度的计算方法	138
6.2.1	Plendel-Gielisse 方法	139
6.2.2	晶体硬度计算的化学键方法	141
6.2.3	硬度计算的键强度方法	145
6.2.4	硬度计算的电负性方法	146
6.2.5	晶体硬度计算的晶格能密度方法	147
6.3	超硬晶体	150
6.3.1	各种结构的 BC_2N 晶体	150
6.3.2	各种结构的 C_3N_4 晶体	152
6.3.3	$C_{11}N_4$ 晶体	154
6.3.4	尖晶石型 $\gamma-A_3N_4$ 晶体	158
6.3.5	立方型 A_3N_4 型晶体	162
	参考文献	163
第 7 章	复杂晶体的结构、组成和性质	165
7.1	AB_2O_4 型晶体	165
7.1.1	正交晶系 AB_2O_4 型晶体	165
7.1.2	立方晶系 AB_2O_4 型晶体	167
7.2	ABO_4 型晶体	174
7.3	烧绿石 $A_2B_2O_7$ 型晶体	182
7.4	Ln_2O_2S 型晶体	188
7.5	$LnOX(X=Cl, Br, I)$ 型晶体	190
7.6	ABO_3 型晶体	196
7.6.1	正交晶系 ABO_3 型晶体	196
7.6.2	立方晶系 ABO_3 型晶体	199
7.6.3	三角晶系 ABO_3 型晶体	202
7.7	$Ca_4LnO(BO_3)_3(Ln=La, Sm, Gd, Lu, Y)$ 型晶体	205
	参考文献	208
第 8 章	高温超导晶体的结构和性质	210
8.1	$LnBa_2Cu_3O_7(Ln=Pr, Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Ho, Er, Tm)$ 型晶体的性质	210
8.2	$Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ 晶体的性质	212
8.3	$Tl_2Ba_2CaCu_2O_8$ 和 $Tl_2Ba_2Ca_2Cu_3O_8$ 晶体的性质	215
8.3.1	$Tl_2Ba_2CaCu_2O_8$ 晶体的性质	216
8.3.2	$Tl_2Ba_2Ca_2Cu_3O_{10}$ 晶体的性质	219

8.4	$\text{LnFeMO}(\text{M}=\text{As}, \text{P})$ 晶体的性质	220
8.5	BaFe_2As_2 晶体的性质	226
	参考文献	227
附录		229
A.1	基本物理常数	229
A.2	物理单位换算	229
A.3	晶面间距和单胞体积	230
A.4	晶体的离子半径	231
A.5	32种点群的对称操作和特征标表	247

第 1 章 晶体的对称性及其基本概念

1.1 晶体的点称性

晶体的对称性包括方向上的旋转对称性和位置上的平移对称性。旋转对称性也称为点称性,是以点对称操作形式呈现的。点对称操作是在操作过程中至少保持一个不动点的对称操作,可分为两类:第一类点对称操作和第二类点对称操作。第一类点对称操作是真旋转,即绕任意一个轴线的旋转,被作用的对象没有手性变化;第二类点对称操作是象旋转,是反演和旋转相结合的操作,被作用的对象有手性变化^[1,2]。

晶体中第一类点对称操作只有 1, 2, 3, 4, 6 次旋转对称轴五种操作。第二类点对称操作也有五种,表示为 $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$ 。在熊夫利(Schoenflies)的方案中,第二类点对称操作是反映和旋转相结合的操作,称为映转操作。对称要素称为映转轴,符号表示为 S_1, S_2, S_3, S_4, S_6 。映转轴和象旋转的对应关系如下:

$$S_1 \leftrightarrow \bar{2}$$

$$S_2 \leftrightarrow \bar{1}$$

$$S_3 \leftrightarrow \bar{6}$$

$$S_4 \leftrightarrow \bar{4}$$

$$S_6 \leftrightarrow \bar{3}$$

晶体的对称操作是指晶体的几何图像经过任何一种对称操作后,包括旋转,反映和反演,不改变图像的形状和图像中任何两个质点间的距离,使图像得以复原。

1.2 对称操作的符号和含义

1. 第一类点对称操作

正旋转操作是群的元素,它被表示如下:

$E(1)$: 恒等操作,绕旋转轴旋转 $+360^\circ$ 。

$C_2(2)$: 绕旋转轴旋转 $+180^\circ$ 。

$C_3(3)$: 绕旋转轴旋转 $+120^\circ$ 。

$C_4(4)$: 绕旋转轴旋转 $+90^\circ$ 。

$C_6(6)$: 绕旋转轴旋转 $+60^\circ$ 。

逆旋转操作也是群的元素,它被表示如下:

C_2^{-1} : 绕旋转轴旋转 -180° 。

C_3^{-1} : 绕旋转轴旋转 -120° 。

C_4^{-1} : 绕旋转轴旋转 -90° 。

C_6^{-1} : 绕旋转轴旋转 -60° 。

2. 第二类点对称操作

I : 反演操作。

σ : 垂直于 C_2 轴的反射面。

σ_h : 垂直于主对称轴的反射面。

σ_v : 包含对称主轴的反射面。

σ_d : 包含对称主轴,并且垂直平分主轴的两个二重轴夹角的反射面。

S_n : 旋转后再对垂直于主轴的平面反映, $n = 3, 4, 6$ 。

1.3 点 群

点对称操作的集合在数学上构成点群,晶体学的点群共有 32 种,称为 32 种晶体学点群^[3~6]。点群的符号可以用国际符号和 Schoenflies 符号表示,它们的对应关系见表 1.1,每个点群所包含的具体对称操作见附录 A.5。

表 1.1 点群的符号和对称性特征

点群类型	符号类型的意义	点群符号	点群数目
C_n	具有 n 度旋转轴	$C_1(1), C_2(2), C_3(3),$ $C_4(4), C_6(6)$	5
C_i	反演中心(i)	$C_i(\bar{1})$	1
C_s	对称面(m)	$C_s(m)$	1
C_{nh}	h 代表除 n 度轴外,再加上 σ_h 操作	$C_{2h}\left(\frac{2}{m}\right), C_{3h}(\bar{6}),$ $C_{4h}\left(\frac{4}{m}\right), C_{6h}\left(\frac{6}{m}\right)$	4
C_{nv}	v 代表除 n 度轴外,再加上 σ_v 操作	$C_{2v}(mn2), C_{3v}(3m),$ $C_{4v}(4mm), C_{6v}(6mm)$	4
D_n	具有 n 度旋转轴和与 n 度旋转轴相垂直的 2 度轴	$D_2(222), D_3(32),$ $D_4(422), D_6(622)$	4

续表

点群类型	符号类型的意义	点群符号	点群数目
D_{nh}	具有 n 度旋转轴和与 n 度旋转轴相垂直的 2 度轴, 再加上 σ_h 操作	$D_{2h}(mmm), D_{3h}(\bar{6}m2),$ $D_{4h}\left(\frac{4}{mmm}\right), D_{6h}\left(\frac{6}{mmm}\right)$	4
D_{nd}	具有 n 度旋转轴和与 n 度旋转轴相垂直的 2 度轴, 再加上 σ_d 操作	$D_{2d}(\bar{4}2m), D_{3d}(\bar{3}m)$	2
S_n	经 n 度旋转后再对垂直于该轴的平面反映	$S_4(\bar{4}), S_6(\bar{3})$	2
T	四个 3 度轴和三个 2 度轴	$T(23)$	1
T_h	除四个 3 度轴, 三个 2 度轴外, 再加上 σ_h 操作	$T_h(m\bar{3})$	1
T_d	除四个 3 度轴, 三个 2 度轴外, 再加上 σ_d 操作	$T_d(\bar{4}3m)$	1
O	八个 3 度轴, 六个 4 度轴, 六个过原点的 2 度轴和三个四面体的 2 度轴	$O(432)$	1
O_h	除 O 群对称外, 再加上 σ_h 操作	$O_h(m\bar{3}m)$	1
合计			32

1.4 晶体的晶胞和晶系

可以取晶体中的任何一个重复单元作为晶胞, 基元晶胞是体积最小的重复单元, 它充分地反映了晶体结构的平移对称性。但是, 基元晶胞没有考虑到晶体的点对称性, 因此, 为了使重复单元既有平移对称性又有点对称性, 人们在研究晶体结构时通常选取比基元晶胞大一些的晶胞, 这种晶胞称为惯用晶胞, 目前固体物理和晶体学的研究领域中所指的晶胞就是这种晶胞。选取惯用晶胞的原则如下:

- (1) 尽可能选取高次旋转轴的方向为晶轴方向。
- (2) 晶胞外形尽可能反映空间点阵的点对称性。
- (3) 独立的晶胞参数最少, 并且尽量使晶轴矢量相交成直角。
- (4) 在满足上述原则下, 尽可能使晶胞体积最小。

晶体的对称性有 32 种。将晶体晶轴矢量和晶胞相同的点群归成一类, 称为晶系, 晶体可分成 7 个晶系。详细情况见表 1.2。

表 1.2 晶体的晶系、晶胞参数和点群分类

晶系名称	晶胞参数	对称性特征
三斜晶系	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	$C_1(1), C_i(\bar{1})$
单斜晶系	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	$C_2(2), C_s(m), C_{2h}\left(\frac{2}{m}\right)$
正交晶系	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$D_2(222), C_{2v}(mn2), D_{2h}(mmm)$
四方晶系	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$C_4(4), S_4(\bar{4}), D_4(422), C_{4h}\left(\frac{4}{m}\right),$ $C_{4v}(4mm), D_{2d}(\bar{4}2m), D_{4h}\left(\frac{4}{mmm}\right)$
三方晶系	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$C_3(3), S_6(\bar{3}), D_3(32), C_{3v}(3m),$ $D_{3d}(\bar{3}m)$
六方晶系	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$C_6(6), C_{3h}(\bar{6}), C_{6h}\left(\frac{6}{m}\right), C_{6v}(6mm),$ $D_6(622), D_{3h}(\bar{6}m2), D_{6h}\left(\frac{6}{mmm}\right)$
立方晶系	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$T(23), T_h(m\bar{3}), T_d(\bar{4}3m), O(432),$ $O_h(m\bar{3}m)$

1.5 布拉维点阵

每种晶系都有一个只在顶角存在格点的简单晶胞,这种晶胞延伸形成简单点阵,或者称为简单格子,通常用符号“P”表示。在简单晶胞的基础上可以增加新的格点,但是,增加格点后仍要保持原有晶胞的平移对称性和点对称性。所以,格点只能加在一些特殊的位置上:①加在晶胞的体心上,用符号“I”表示。②加在晶胞的某一个面心上,用符号“A”,“B”或“C”表示。③加在晶胞的全部面心上,用符号“F”表示。④对于三角晶系,当取菱形晶胞时,用符号“R”表示。这样,7种晶系共有14种形式的晶胞,也就是14种布拉维点阵或布拉维格子,具体形式见图1.1^[1,3,4,7]。

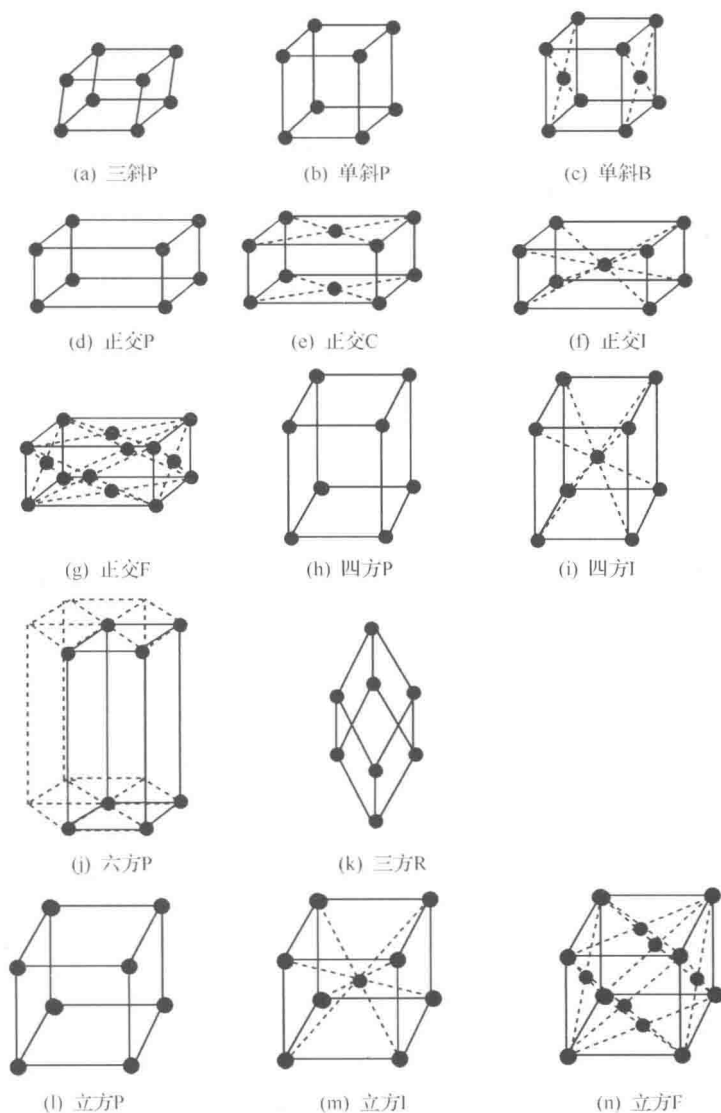


图 1.1 14种布拉维点阵

1.6 晶体的平移对称性

晶体结构具有周期性,每一个空间点阵的矢量代表一个平移对称操作,整个点阵按某个矢量进行平移操作之后,所有的格点都移到另一些格点的位置上,使

整个空间点阵图形复原,这种操作称为平移对称操作,这种性质叫做平移对称性。

对称操作分为两大类:点式对称操作和非点式对称操作。点式对称操作是在操作过程中至少保持一个不动点的对称操作,1.1~1.5节已经做了较详细的介绍。没有不动点的对称操作称为非点式对称操作,如平移对称操作。平移对称操作的元素是格矢,各种平移矢量的集合构成的群,称为平移群。平移群是交换群,也是无限群^[1,5]。

非点式对称操作在空间点阵中可以用两种方式进行描述:滑移操作和螺旋操作。滑移操作中按平移的方向和平移量的大小将滑移分为轴滑移,对角线滑移和金刚石滑移三类。轴滑移有 a 滑移, b 滑移, c 滑移三种,它们的滑移方向依次平行于 a, b, c 轴,滑移量分别是 $a/2, b/2, c/2$ 。对角滑移的滑移方向是 $a \pm b, b \pm c, c \pm a$ 或 $a \pm b \pm c$,滑移量是对角线长度的二分之一,即 $(a \pm b)/2, (b \pm c)/2, (c \pm a)/2$ 或 $(a \pm b \pm c)/2$ 。对角线滑移常用符号“ n ”表示,又称为 n 滑移。金刚石滑移的滑移方向是对角线方向,滑移量是对角线长度的四分之一,即 $(a \pm b)/4, (b \pm c)/4, (c \pm a)/4$ 或 $(a \pm b \pm c)/4$ 。金刚石滑移常用符号“ d ”表示,又称为 d 滑移。螺旋操作是 n 度旋转和平行于旋转轴矢量的分数平移量的结合操作,该 n 度旋转轴称为 n 度螺旋轴,它与点对称的旋转轴一样,只有五种旋转方式。假设 t 是 n 度旋转轴的周期矢量,则平移量 m 是 t/n 的整数倍, m 是小于 n 的整数。 n 度螺旋轴的国际符号为 n_m ,共有11种: $2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$ 。

1.7 晶体的空间群

晶体的全部点式对称操作和非点式对称操作的集合构成空间群,空间群可分为两类:简单空间群,或称点式空间群;复杂空间群,或称非点式空间群。

点式空间群是由32种点群中的每一种点群和它所属晶系中可能有的布拉维点阵相结合导出的。32种点群和14种布拉维点阵共可导出66种点式空间群。如果考虑点群对称要素和点阵之间的取向关系,又可以得到7种点式空间群,这样,总共有73种点式空间群。如果晶体点阵还有非点式对称操作,可以进一步导出其他的非点式空间群。晶体结构共有230种空间群,包括73种点式空间群和157种非点式空间群。空间群的简略国际符号和序号见表1.3。空间群中编号用黑斜体字标记的空间群表示点式空间群。空间群的符号表示还可以用Schoenflies符号表示,这里不再详细介绍,有兴趣读者可查相关文献^[1,2,7]。

表 1.3 晶系,点群和空间群

晶系	点群	空间群的符号和序号
三斜	$C_1(1)$	$P1$ (Na 1)
	$C_1(\bar{1})$	$P\bar{1}$ (Na 2)
单斜	$C_2(2)$	$P2$ (Na 3), $P2_1$ (No. 4), $C2$ (Na 5)
	$C_s(m)$	Pm (Na 6), Pc (No. 7), Cm (Na 8), Cc (No. 9)
	$C_{2h}\left(\frac{2}{m}\right)$	$P2/m$ (Na 10), $P2_1/m$ (No. 11), $C2/m$ (Na 12), $P2/c$ (No. 13), $P2_1/c$ (No. 14), $C2/c$ (No. 15)
正交	$D_2(222)$	$P222$ (Na 16), $P222_1$ (No. 17), $P2_12_12$ (No. 18), $P2_12_12_1$ (No. 19), $C222_1$ (No. 20), $C222$ (Na 21), $F222$ (Na 22), $I222$ (Na 23), $I2_12_12_1$ (No. 24)
	$C_{2v}(mm2)$	$Pmm2$ (Na 25), $Pmc2_1$ (No. 26), $Pcc2$ (No. 27), $Pma2$ (No. 28), $Pca2_1$ (No. 29), $Pnc2_1$ (No. 30), $Pmn2_1$ (No. 31), $Pba2$ (No. 32), $Pna2_1$ (No. 33), $Pnn2$ (No. 34), $Gmm2$ (No. 35), $Cmc2_1$ (No. 36), $Ccc2$ (No. 37), $Amm2$ (Na 38), $Abm2$ (No. 39), $Ama2$ (No. 40), $Aba2$ (No. 41), $Fmm2$ (Na 42), $Fdd2$ (No. 43), $Imm2$ (Na 44), $Iba2$ (No. 45), $Ima2$ (No. 46)
	$D_{2h}(mmm)$	$Pmmm$ (Na 47), $Pnmm$ (No. 48), $Pccm$ (No. 49), $Pban$ (No. 50), $Pmma$ (No. 51), $Pnma$ (No. 52), $Pmna$ (No. 53), $Pcca$ (No. 54), $Pbam$ (No. 55), $Pccn$ (No. 56), $Pbcm$ (No. 57), $Pnmm$ (No. 58), $Pmnn$ (No. 59), $Pbcn$ (No. 60), $Pbca$ (No. 61), $Pnma$ (No. 62), $Cnccm$ (No. 63), $Cnca$ (No. 64), $Gmmm$ (Na 65), $Cccm$ (No. 66), $Cmma$ (No. 67), $Ccca$ (No. 68), $Fmnm$ (Na 69), $Fddd$ (No. 70), $Immm$ (Na 71), $Ibam$ (No. 72), $Ibca$ (No. 73), $Imma$ (No. 74)
四方	$C_4(4)$	$P4$ (Na 75), $P4_1$ (No. 76), $P4_2$ (No. 77), $P4_3$ (No. 78), $I4$ (Na 79), $I4_1$ (No. 80)
	$S_4(\bar{4})$	$P\bar{4}$ (Na 81), $I\bar{4}$ (Na 82)
	$C_{4h}\left(\frac{4}{m}\right)$	$P4/m$ (Na 83), $P4_2/m$ (No. 84), $P4/n$ (No. 85), $P4_2/n$ (No. 86), $I4/m$ (Na 87), $I4_1/a$ (No. 88)
	$D_4(422)$	$P422$ (Na 89), $P42_12$ (No. 90), $P4_122$ (No. 91), $P4_12_12$ (No. 92), $P4_222$ (No. 93), $P4_22_12$ (No. 94), $P4_322$ (No. 95), $P4_32_12$ (No. 96), $I422$ (Na 97), $I4_122$ (No. 98)
$C_{4v}(4mm)$	$P4mm$ (Na 99), $P4bm$ (No. 100), $P4_2cm$ (No. 101), $P4_2nm$ (No. 102), $P4cc$ (No. 103), $P4nc$ (No. 104), $P4_2mc$ (No. 105), $P4_2bc$ (No. 106), $I4mm$ (Na 107), $I4cm$ (No. 108), $I4_1md$ (No. 109), $I4_1cd$ (No. 110)	

续表

晶系	点群	空间群的符号和序号
四方	$D_{2d}(\bar{4}2m)$	$P\bar{4}2m$ (Na 111), $P\bar{4}2c$ (No. 112), $P\bar{4}2_1m$ (No. 113), $P\bar{4}2_1c$ (No. 114), $P\bar{4}m2$ (Na 115), $P\bar{4}c2$ (No. 116), $P\bar{4}b2$ (No. 117), $P\bar{4}n2$ (No. 118), $I\bar{4}m2$ (Na 119), $I\bar{4}c2$ (No. 120), $I\bar{4}2m$ (Na 121), $I\bar{4}2d$ (No. 122)
	$D_{4h}\left(\frac{4}{mmm}\right)$	$P4/m\bar{m}m$ (Na 123), $P4/mcc$ (No. 124), $P4/nbm$ (No. 125), $P4/mc$ (No. 126), $P4/mbm$ (No. 127), $P4/nnc$ (No. 128), $P4/nmm$ (No. 129), $P4/ncc$ (No. 130), PA_1/nnc (No. 131), PA_2/mcm (No. 132), PA_2/nbc (No. 133), PA_2/nmm (No. 134), PA_2/nbc (No. 135), PA_2/nmm (No. 136), PA_2/nnc (No. 137), PA_2/ncc (No. 138), IA/nmm (Na 139), IA/mcm (No. 140), IA_1/amd (No. 141), IA_1/acd (No. 142)
三方	$C_3(3)$	$P3$ (Na 143), $P3_1$ (No. 144), $P3_2$ (No. 145), $R3$ (Na 146)
	$S_6(\bar{3})$	$P\bar{3}$ (Na 147), $R\bar{3}$ (Na 148)
	$D_3(32)$	$P312$ (Na 149), $P321$ (Na 150), $P3_112$ (No. 151), $P3_121$ (No. 152), $P3_212$ (No. 153), $P3_221$ (No. 154), $R32$ (Na 155)
	$C_{3v}(3m)$	$P3m1$ (Na 156), $P31m$ (Na 157), $P3c1$ (No. 158), $P31c$ (No. 159), $R3m$ (Na 160), $R3c$ (No. 161)
	$D_{3d}(\bar{3}m)$	$P\bar{3}1m$ (Na 162), $P\bar{3}1c$ (No. 163), $P\bar{3}m1$ (Na 164), $P\bar{3}c1$ (No. 165), $R\bar{3}m$ (Na 166), $R\bar{3}c$ (No. 167)
六方	$C_6(6)$	$P6$ (Na 168), $P6_1$ (No. 169), $P6_5$ (No. 170), $P6_2$ (No. 171), $P6_4$ (No. 172), $P6_3$ (No. 173)
	$C_{3h}(\bar{6})$	$P\bar{6}$ (Na 174)
	$C_{6h}\left(\frac{6}{m}\right)$	$P6/m$ (Na 175), $P6_3/m$ (No. 176)
	$D_6(622)$	$P622$ (Na 177), $P6_122$ (No. 178), $P6_522$ (No. 179), $P6_222$ (No. 180), $P6_422$ (No. 181), $P6_322$ (No. 182)
	$C_{6v}(6mm)$	$P6mm$ (Na 183), $P6cc$ (No. 184), $P6_3cm$ (No. 185), $P6_3mc$ (No. 186)
	$D_{3h}(\bar{6}m2)$	$P\bar{6}m2$ (Na 187), $P\bar{6}c2$ (No. 188), $P\bar{6}2m$ (Na 189), $P\bar{6}2c$ (No. 190)
	$D_{6h}\left(\frac{6}{mmm}\right)$	$P6/nmm$ (Na 191), $P6/mcc$ (No. 192), $P6_3/mcm$ (No. 193), $P6_3/nnc$ (No. 194)