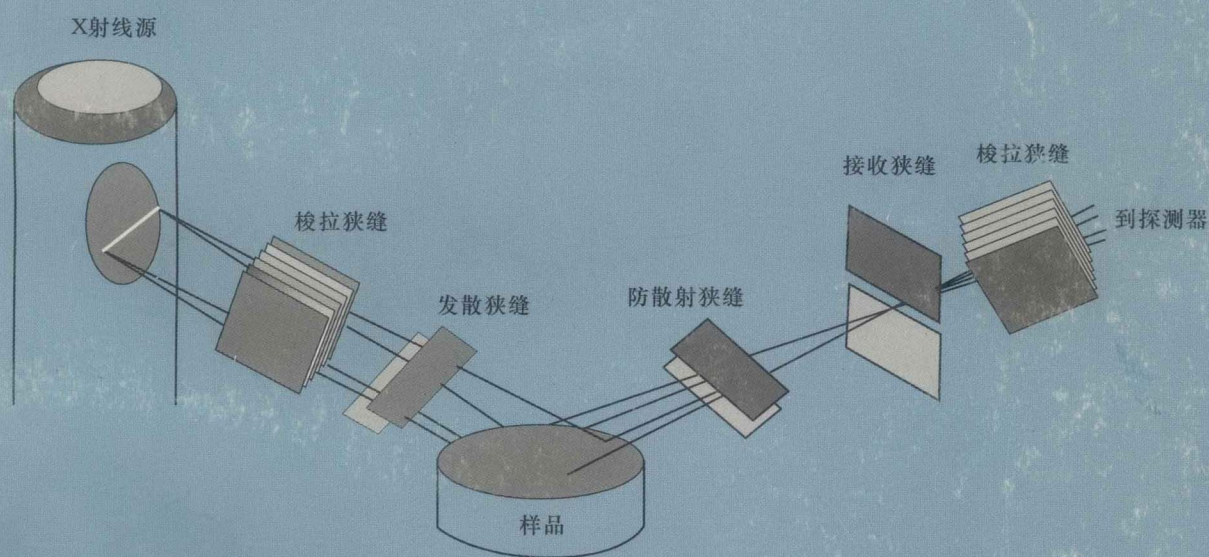


粉晶X射线分析实用教程

FENJING X SHEXIAN FENXI SHIYONG JIAOCHENG

韩照信 编译

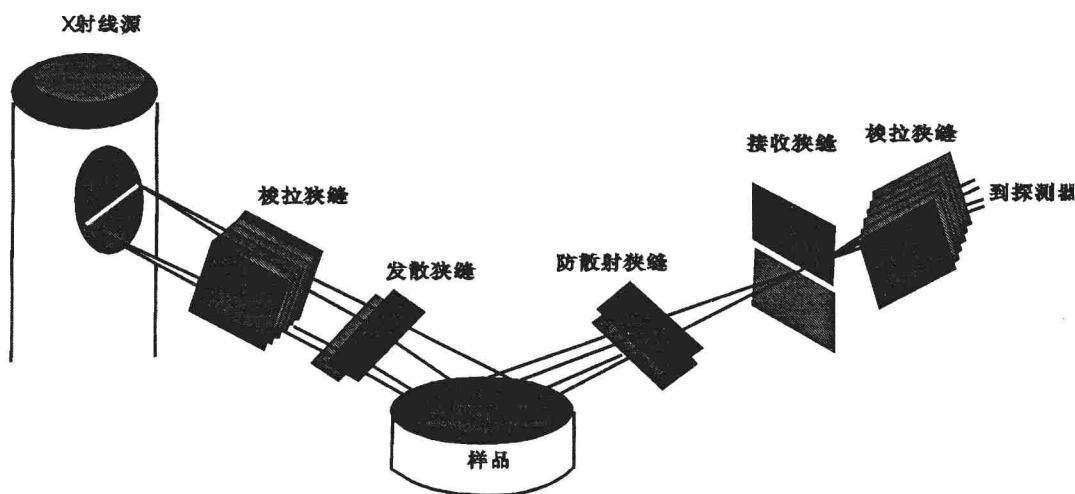


西安地图出版社

粉晶X射线分析实用教程

FENJING X SHEXIAN FENXI SHIYONG JIAOCHENG

韩照信 编译



西安地图出版社

图书在版编目(CIP)数据

粉晶 X 射线分析实用教程/韩照信编译. —西安:
西安地图出版社, 2004. 9
ISBN 7-80670-702-6

I. 粉... II. 韩... III. 晶体—X 射线分析—教材
IV. 072

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 098808 号

内 容 提 要

全书共分两部分。第一部分基础, 介绍粉晶 X 射线衍射的基本理论; 第二部分为实验, 除物相分析和混合样的定量分析外, 还介绍了利用粉晶 X 射线衍射测定晶体结构、相图、有序度、晶粒大小和格子应变等的技术。

本教材可作为材料、冶金、地质类专业的大学生教材, 也可供其他以 X 射线衍射技术表征物质的人员参考。

粉晶 X 射线分析实用教程

韩照信 编译

西安地图出版社出版发行

(西安市友谊东路 334 号 邮政编码: 710054)

新华书店经销 长安大学雁塔印刷厂印刷

787 毫米×1092 毫米·1/16 开本 12.125 印张 340 千字

2004 年 9 月第 1 版 2004 年 9 月第 1 次印刷

印数 1—1000

ISBN 7-80670-702-6/P·20

定价: 35.00 元

前 言

在晶质和非晶质物质中原子尺度的信息表征方面,X 射线衍射是非常重要的技术。1912 年晶体中 X 射线衍射的发现(马克思·万·劳埃)和 1913 年它对结构测定的应用(W·L·布拉格和他的父亲 W·H·布拉格)为这种技术在金属和合金、矿物、无机化合物、聚合物和有机物质,事实上为所有结晶物质的晶体结构测定中的成功应用铺平了道路。其后,X 射线衍射技术也应用于获取物质精细结构的信息,如晶粒大小、格子应变、化学成分、有序化状态等等。

在许多 X 射线衍射的著作中,大多数是在理论上论述这一题目的。这样,读者可以学习 X 射线衍射物理学,可以得到一些有关如何记录一个 X 射线衍射花样和如何从中获取有用信息方面的知识。而本书的主要目标是使学生能够分析各种物质在不同情况下的 X 射线衍射花样,并能从衍射花样中获取尽可能多的信息。

这本书分为两部分:第一部分——基础,第二部分——实验模块。第一部分包括理解 X 射线衍射现象所必要的基本原理。第一章介绍晶体构造的几何学,包括空间格子、面网、行列、晶体构造的对称。第二章介绍 X 射线衍射的一般背景:什么是 X 射线?它是怎样产生的?它是如何衍射的?第三章回顾物质所具有的各种晶体结构的概念。另外,也包括结晶物质的 X 射线衍射现象,结构因子的概念,反射缺席的选择定则。第四章包括在获得有用 X 射线衍射花样中所涉及的实验事项的概述,以及关于 X 射线衍射花样的解释和意义的简要介绍。虽然在第一部分也叙述了理论方面,但更多地强调的是现象和概念的物理意义,书中用加框的文字进一步解释一些细节,或可能的混乱。

第二部分包括 8 个实验模块。每一个实验模块包含一个题目。例如,第一个实验模块解释立方晶系物质的一个 X 射线衍射花样是如何被指标化的。在每个实验模块中,以所获得的实际实验资料为基础,举例说明。在实验模块的后面还包括几个基于该实验模块内容的练习。每一个实验模块遵循着相似的格式。

本书主要用于材料科学或冶金学专业的在校大学生。然而它对于地质、物理、化学或者类似的用 X 射线衍射技术表征物质的其他自然科学的在校大学生也是十分有用的。

本书没有包括 X 射线对物质的所有应用,它只论述多晶(通常为粉晶)。对粉晶物质的 X 射线衍射还有一些其他的重要应用。因为本书是用于大学生的教程,所以一些特殊的更深层次的题目都没有包括进去。

在编译过程中,北京大学丁富荣教授提供了最新的外文资料,长安大学栾丽君同志承担了部分编译任务,硕士研究生张锦刚、孙婧、谭晨曦、孙志华、梁庆宣、赵阿宁、夏明哲、姜寒冰、丁雪峰、樊晓鹏、杜波、赵志刚,大学生林忠海、翟光美、院晓丽等参与了部分工作。在此对他们付出的努力和做出的贡献表示衷心的感谢。

编 者

2004 年 8 月

目 录

第一部分 基础

第一章 晶体构造的几何学	1
1.1 空间格子	1
1.2 晶格中面网、行列、结点的符号	3
1.2.1 面网符号	3
1.2.2 行列符号	9
1.2.3 结点符号	9
1.3 晶体构造的对称	9
1.3.1 点群	9
1.3.2 晶体内部构造的对称要素	9
1.3.3 空间群	11
1.3.4 等效点系	12
第二章 X射线和衍射	18
2.1 X射线	18
2.2 X射线的产生	19
2.3 衍射	25
2.4 简要的历史回顾	27
第三章 空间格子和晶体结构	29
3.1 固体类型和有序	29
3.2 点阵格子和单位晶胞	30
3.3 晶系和布拉维格子	30
3.4 晶体结构	32
3.4.1 每个结点一个原子	32
3.4.2 每个结点有两个同种原子	34
3.4.3 每个结点两个不同的原子	39
3.4.4 每个结点两个以上原子	41
3.5 对于晶体结构的标记	42
3.6 米勒尔指数	42
3.7 结晶物质的衍射——布拉格法则	48
3.8 结构因子	51
3.9 非晶质物质的衍射	57

第四章 实用 X 射线衍射	59
4.1 X 射线衍射仪几何学	59
4.2 X 射线衍射仪组成	60
4.2.1 X 射线源	60
4.2.2 样品	61
4.2.3 光学系统	61
4.2.4 探测器	64
4.3 标准的 X 射线衍射花样的检查	69
4.4 信息的来源	72
4.5 X 射线的防护	73
4.6 实验模块介绍	76

第二部分 实验模块

模块 1 晶体结构的测定 I :立方结构	78
模块 2 晶体结构的测定 II :六方结构	94
模块 3 精确格子参数的测量	113
模块 4 相图测定	122
模块 5 长程有序的发现	137
模块 6 晶粒大小和格子应变的测定	145
模块 7 混合粉末样的定量分析	156
模块 8 未知样品的鉴定	166

附录

附录 1 230 个空间群	175
附录 2 面网间距公式和晶胞体积	176
附录 3 立方晶系米勒尔指数的平方形式	178
附录 4 一些元素的原子和离子散射因子	179
附录 5 简要结构因子计算	180
附录 6 一些元素的质量吸收系数 $\mu/\rho(\text{cm}^2/\text{g})$ 和相对密度 $\rho(\text{g}/\text{cm}^3)$	181
附录 7 多重因子	182
附录 8 罗伦茨—偏振化因子 $\left[\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \right]$	182
附录 9 物理常数和转换因子	184
附录 10 一些常见物质的 JCPDS—ICDD 卡编号	185
附录 11 一些物质的晶体结构和格子参数	186
主要参考文献	187

第一部分 基础

第一章 晶体构造的几何学

1.1 空间格子

晶体构造的最明显特征是其中的质点在三维空间作有规律的重复。表示晶体构造的规律性的几何图形，就是空间格子。空间格子的一般形式如图 1 所示。空间格子中的点称为结点，这些结点代表着晶体构造中的相当点(只有原子种类相同，原子周围的环境和方位都相同的点才能算成相当点)。为此，空间格子是晶体构造中的相当点在三维空间排列而成的。

排列在一条直线上的结点就组成行列(图 2)。一条行列中相邻结点的距离称为该行列的结点间距。平行的行列中的结点间距相等。行列中结点间距一般以 T 表示，与晶轴 X、Y、Z 平行的行列的结点间距以 a_0 、 b_0 、 c_0 表示。行列间的角度一般以“ τ ”表示。与晶轴平行的行列间的夹角以 α 、 β 、 γ 表示。

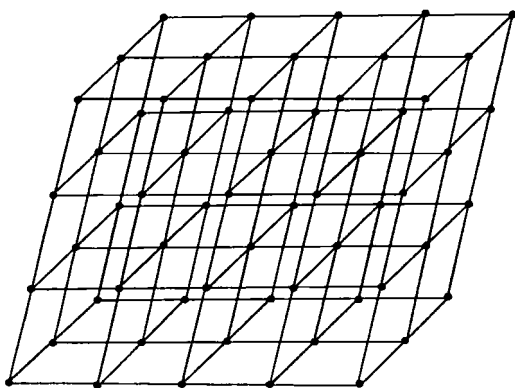


图 1 空间格子

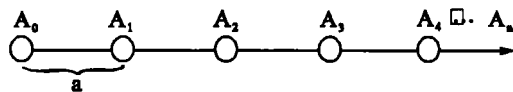


图 2 行列

排列在一个平面上的结点就组成面网(图 3)。在面网中结点分布于平行四边形的角顶上。

空间格子的单位是平行六面体(或称单位晶胞)(图 4)。在空间格子中选择单位晶胞时根据下列原则：

- (1) 所选择的平行六面体应将整个空间格子的对称包括进去；
- (2) 平行六面体中相等的棱和角的数目要尽可能多；
- (3) 当平行六面体的棱之间存在有直角时，直角的数目要力求最多；
- (4) 在遵守上述三项条件的前提下，要使平行六面体的体积最小。

以图 5 为例。图中的空间格子的晶胞选择只有 a 符合上述 4 个条件。b、c、d 与第 1 条不符合；b、c 与第 2、3 条不符合；e 不符合于第 4 条。

晶胞的大小形状用轴长 a_0 、 b_0 、 c_0 和轴角 α 、 β 、 γ 表示(图 4)。

空间格子共计有 14 种(称为 14 种布拉维格子)，这 14 种格子按晶系分布如图 6 所示。

空间格子的名称是根据它的晶胞形状与结点(相当点)的分布而确定的。各晶系空间格子的晶胞参数的一般特征为：

等轴(立方)晶系：

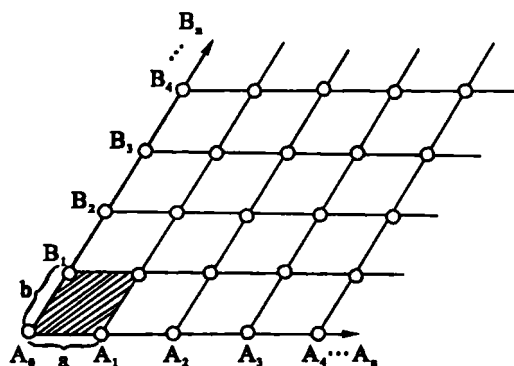


图3 面网

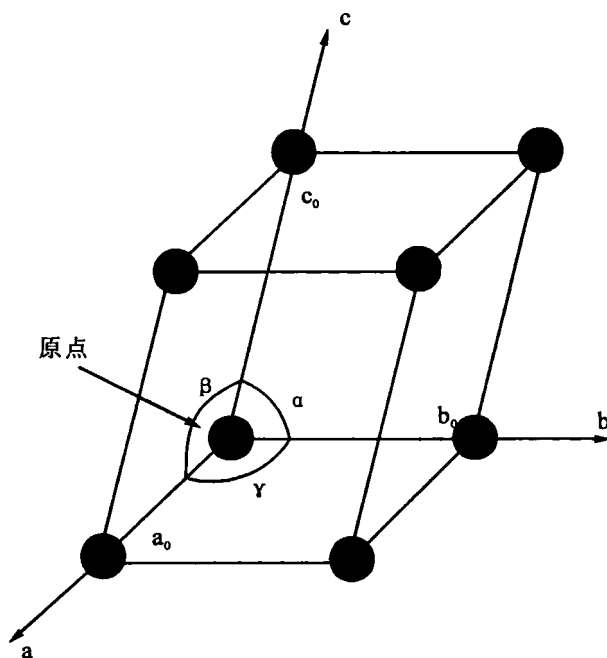


图4 晶胞 (平行六面体)

$$a=b=c; \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$

四方 (正方) 晶系:

$$a=b \neq c; \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ;$$

斜方 (正交) 晶系:

$$a \neq b \neq c; \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ;$$

单斜晶系:

$$a \neq b \neq c; \quad \alpha=\gamma=90^\circ; \quad \beta \neq 90^\circ;$$

三斜晶系:

$$a \neq b \neq c; \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ;$$

六方晶系和三方晶系:

$$a = b \neq c; \quad \alpha = \beta = 90^\circ, \quad \gamma = 120^\circ;$$

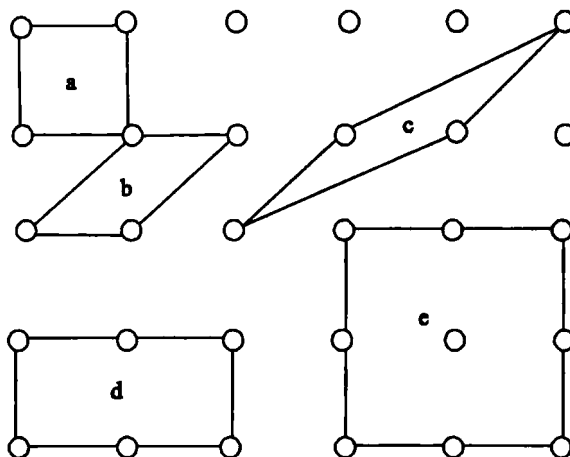


图5 晶胞的选择

三方晶系 (菱形晶胞):

$$a = b = c; \quad \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ.$$

各种类型的格子的晶胞中结点的分布如下:

原始格子 (P 或 R): 结点只分布于晶胞角顶。

底心格子 (A、B、C、H): 结点分布于晶胞的角顶与一对面的中心。

体心格子 (I): 结点分布于晶胞的角顶与中心。

面心格子 (F): 结点分布于晶胞的角顶与面中心。

上述 14 种空间格子有几种格子由于晶胞选择方式不同或方位不同而有不同的符号。

六方底心格子有三种选择晶胞的方法 (图 7), 分别用 P (C)、H 和 O 表示。

斜方底心格子有两种方位 (图 8), 分别用 C、A 表示。

此外, 六方晶胞和菱形晶胞亦可相互转换, 如图 9 所示。三方原始格子可以选择六方晶胞 (图 9.a), 但此时结点的分布与六方底心格子有别, 在平行六面体的一条对角线上有两个附加的结点。同样, 六方底心格子亦可选择成菱形晶胞 (图 9.b)。此时在菱形晶胞内部的主轴上有两点附加的结点。

1.2 晶格中面网、行列、结点的符号

1.2.1 面网符号

面网符号是采用米氏符号, 写成 (hkl) 形式, 括弧中 h 、 k 、 l 为米氏指数, 米氏指数是面网在晶轴上的分数截距的倒数。米氏符号为 (hkl) 的网面在晶轴上的截距为 a/h 、 b/k 、 c/l (图 10.a), 其分数截距为 $1/h$ 、 $1/k$ 、 $1/l$ 。以图 10.b 为例:

$$\text{轴长: } a=4\text{\AA}, b=8\text{\AA}, c=3\text{\AA}$$

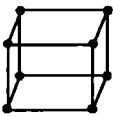
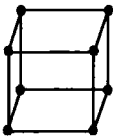
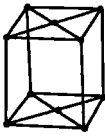
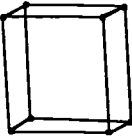
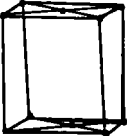
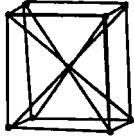
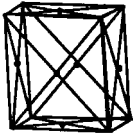
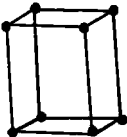
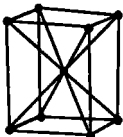
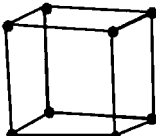
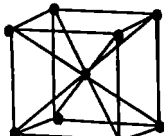
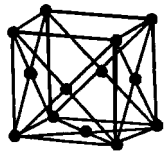
	原始格子(P)	底心格子(C)	体心格子(I)	面心格子(F)
三斜晶系				
单斜晶系				
斜方晶系				
三方与六方晶系*				
四方晶系				
等轴(立方)晶系				

图6 14种空间格子

*三方晶系既有三方原始格子又有六方底心格子，六方晶系只有六方底心格子。

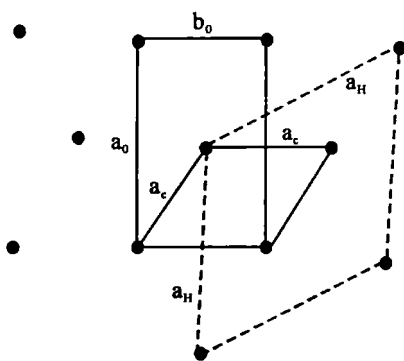


图7 六方底心格子的三种选择晶胞的方法

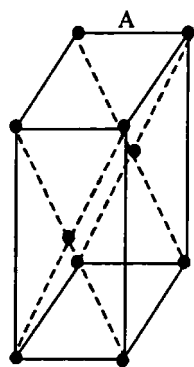
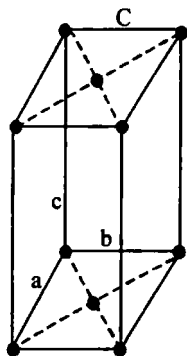


图8 斜方底心格子的两种方位

截 距:	$2\text{\AA}$	$6\text{\AA}$	$3\text{\AA}$
分数截距:	$1/2$	$3/4$	1
米氏符号:	$\left\{ \begin{array}{ccc} 2 & 4/3 & 1 \\ 6 & 4 & 3 \end{array} \right.$		

六方晶格情况有些区别。根据六方晶系的特点要选择四个晶轴，即 $X(a_1)$, $Y(a_2)$, $U(a_3)$, $Z(c)$ 。则相应的其面网符号中应有四个指数 $(hkil)$ ，这种符号称为布拉维符号。其中 $h+k=-i$ 。因此布拉维符号可有简写的形式，如图 11 中打阴影的面网的符号如 $(10\bar{1}1)$ 、 $(1\bar{1}00)$ 、 (0001) 、 $(\bar{1}2\bar{1}0)$ 。可简写成： $(10 \cdot 1)$ 、 $(1\bar{1} \cdot 0)$ 、 $(00 \cdot 1)$ 、 $(\bar{1}2 \cdot 0)$ 。

无论是三方原始格子或是六方底心格子，在选择菱面体晶胞时，则菱面体晶胞之棱作为晶轴。其中面网的符号仍然只有三个指数。

因此三方原始格子当选择菱形晶胞和选择六方晶胞时，其面网的符号有别。如果以 $(HK \cdot L)$ 代表选择六方晶胞时的符号，以 (hkl) 代表同一面网在选择菱形晶胞时的符号，它们之间有下列关系。由米氏指数转换成布拉维指数的方程式为（参看图 9.a）：

$$\begin{aligned} H &= h - k; \\ K &= k - l; \\ L &= h + k + l; \end{aligned}$$

相应地，由布拉维指数转换成米氏指数要采用下列方程式：

$$h = \frac{1}{3} (2H + K + L)$$

$$k = \frac{1}{3} (-H + K + L)$$

$$l = \frac{1}{3} (-H - 2K + L)$$

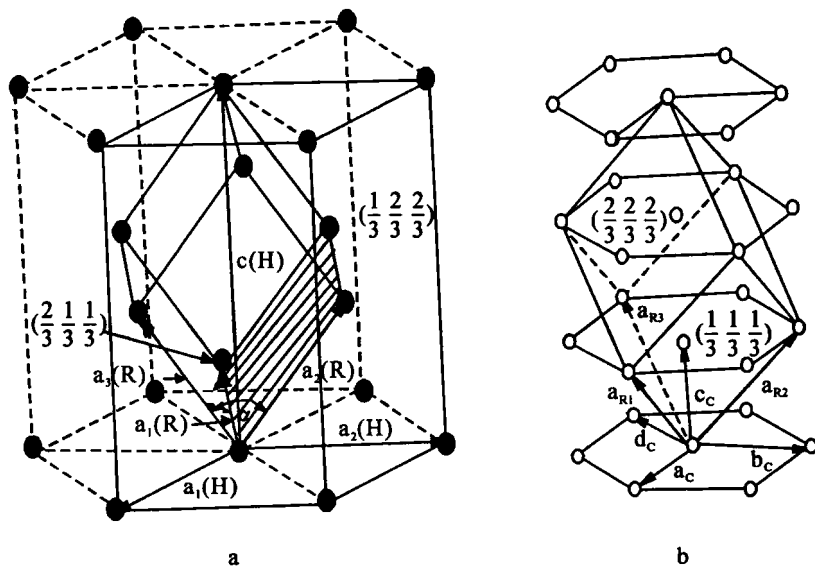


图9 (a) 三方原始格子六方定向; (b) 六方底心格子三方定向

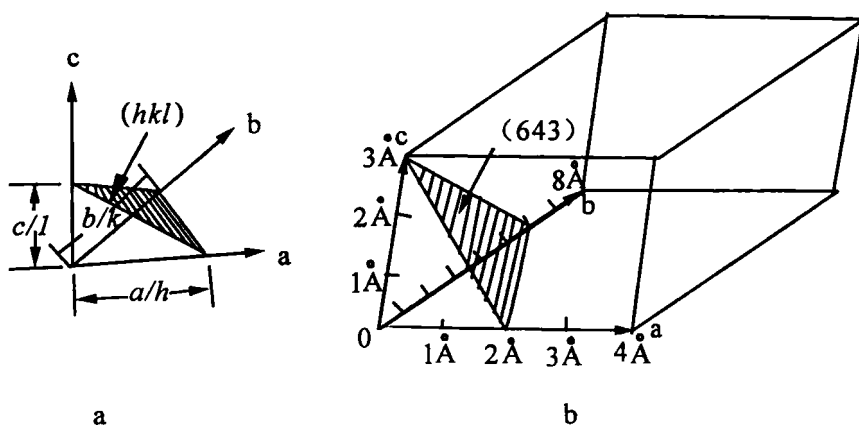


图10 面网符号

由已知六方晶胞的轴长 a 和 c ，求菱形晶胞的轴长 a_R 和轴角 α 时，采用下式：

$$a_R = \frac{1}{3} \sqrt{3a^2 + c^2}$$

$$\sin \frac{\alpha}{2} = \frac{3}{2\sqrt{3+(c/a)^2}}$$

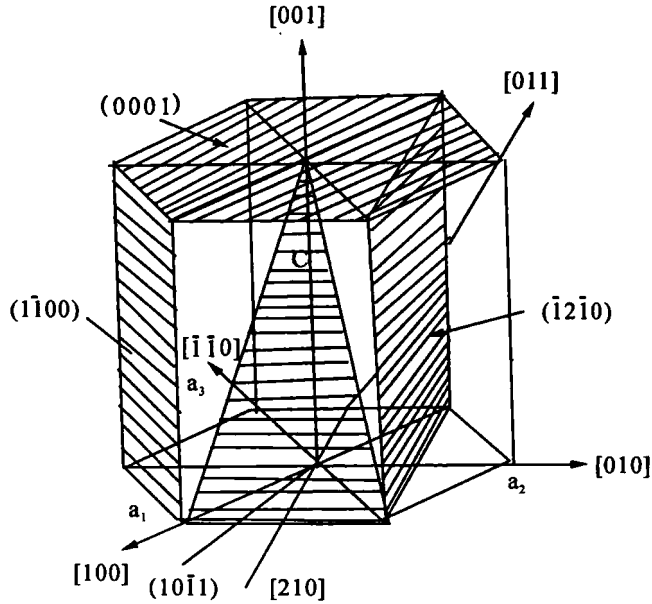


图 11 六方格子的面网符号与行列符号

反之，已知菱面体格子的晶胞参数 a_R 和 α ，求六方晶胞的晶胞参数 a_H 、 c_H ，用下式：

$$a_H = 2 a_R \cdot \sin \frac{\alpha}{2}$$

$$c_H = 3 a_R \cdot \sqrt{1 - \frac{4}{3}(\sin^2 \frac{\alpha}{2})}$$

对六方底心格子由布拉维指数转换成米氏指数则采用下列方程式（参看图 9.b）：

$$h = H + L$$

$$k = K + L$$

$$l = I + L = L - H - K$$

$$a_R = \sqrt{a^2 + c^2}$$

$$\cos \alpha = \frac{2c^2 - a^2}{2(c^2 + a^2)}$$

面网符号与晶面的米氏符号是有差别的，晶面的米氏符号中的指数总是化为最简单的整数，而且平行的晶面的米氏符号中的指数总是相同的。面网符号则不然，面网符号中的指数不是化成最简

网间距 $d_{(010)}$ 最大, $d_{(020)} = \frac{d_{(010)}}{2}$, $d_{(030)} = \frac{d_{(010)}}{3}$ 。

[illegible]

8

1.2.2 行列符号

行列符号与晶棱符号相当,其形式为 $[uvw]$ 。设通过坐标原点的行列上有一距原点O最近的结点的坐标为U、V、W,则此行列的符号为 $[uvw]$ 。以图13为例,通过原点的行列OM上M点的坐标为 $1a$ 、 $2b$ 、 $3c$ 。则:

$$u:v:w = \frac{MR}{a} : \frac{MK}{b} : \frac{MF}{c} = \frac{1a}{a} : \frac{2b}{b} : \frac{3c}{c} \\ = 1:2:3$$

OM的符号为 $[123]$ 。

同样地可以求出平行X轴的行列的符号为 $[100]$,平行Y轴的行列的符号为 $[010]$,平行Z轴的行列的符号为 $[001]$ 。

其他的例子可参看图14。六方晶系的晶棱符号一般采用三个指数(参看图11中打[]的行列符号)。行列符号是代表一组平行的行列的符号。

1.2.3 结点符号

晶胞中结点的符号写成 $[uvw]$ 的形式,双括弧中 u 、 v 、 w 为结点的坐标。结点的坐标要表示成分数坐标,分数坐标是把轴单位的长度当作一个单位时的结点的坐标。除此之外,晶胞中原子的坐标也是以分数坐标表示。

1.3 晶体构造的对称

1.3.1 点群

点群即对称型,共有32种。根据晶体外形确定点群的方法在结晶学中已有详细的阐述,此处从略。在晶体构造的模型上确定点群,则须在其上找寻其各个方向上的对称要素(包括点动作的对称要素与空间动作的对称要素)。然后将它们平行地移动到会于一点,此时的对称要素的组合就称为点群(螺旋轴在点群中表现为同次的对称轴;滑移面表现为对称面)。32个点群的国际符号与圣佛利斯符号如表1所示。

圣佛利斯符号中,C表示只有一个对称轴的对称型,右下角的数字表示对称轴的轴次,如存在对称中心,则在右下角加字母*i*。如果有与对称轴垂直的对称面时,则在上述符号的右下角加一个字母*h*;如果有与轴平行的对称面,则在其右下角加一符号*v*。D表示只有对称轴的组合,右下角的数字表示其主轴的轴次;如有对称面与主轴平行,而与其余的轴斜交,则在其右下角加一字母*d*;如有对称面与主轴垂直,则在右下角加字母*h*。S代表旋转反映轴,其右下角的数字代表其轴次。T代表四面体的对称轴的组合,O代表八面体的对称轴的组合。

国际符号中,简单对称轴以轴次的数字表示;旋转反伸轴亦用轴次的数目表示,唯在数字之上加“-”号;对称面以*m*表示;当对称面与对称轴垂直时,写作*σ_m*;这表示对称要素的组合为 $L^6 PC$;当对称面平行于对称轴时,则写成 $4mm$,表示 $L^4 4P$ 。

1.3.2 晶体内部构造的对称要素

晶体外形上所存在的对称要素在晶体构造中都可以有。此外还有晶体外形上所没有的对称要素(平移轴、螺旋轴、滑移面)。

表 1

32 点群

晶系	对称型的全部对称要素	圣佛利斯符号	国际符号
三斜晶系	L^1	C_1	1
	C	$C_1=S_2$	$\bar{1}$
单斜晶系	L^2	C_2	2
	P	$C_{1h}=C_s$	m
	L^2PC	C_{2h}	2/m
斜方晶系	$3L^2$	$D_2=V$	222
	L^22P	C_{2v}	mm
	$3L^23PC$	$D_{2h}=V_h$	mmm
四方晶系	L^4	C_4	4
	L_4^1	S_4	$\bar{4}$
	L^44L^2	D_4	42
	L^4PC	C_{4h}	4/m
	L^44P	C_{4v}	4mm
	$L_4^12L^22P$	$D_{2d}=V_d$	$\bar{4}2m$
	L^44L^25PC	D_{4h}	4/mmm
三方晶系	L^3	C_3	3
	L^3C	$C_{3h}=S_6$	$\bar{3}$
	L^33L^2	D_3	32
	L^33P	C_{3v}	3m
	L^33L^2PC	D_{3d}	$\bar{3}m$
六方晶系	L_6^1	C_6	$\bar{6}$
	$L_6^13L^23P$	D_{3h}	$\bar{6}2m$
	L^6	C_6	6
	L^66L^2	D_6	62
	L^6PC	C_{6h}	6/m
	L^66P	C_{6v}	6mm
	L^66L^27PC	D_{6h}	6/mmm
等轴晶系	$3L^24L^3$	T	23
	$3L^24L^33PC$	T_h	m3
	$3L^44L^36P$	T_d	$\bar{4}3m$
	$3L^44L^36L^2$	O	432
	$3L^44L^36L^29PC$	O_h	m3m

平移轴是晶体构造中任何一条行列。当构造沿该行列移动一个或数个结点间距后，构造中的每一质点皆与其相同的质点重合，整个构造自相重合。

螺旋轴是晶体构造中假想的直线。当构造围绕此直线旋转一定角度并沿此轴移动一定的距离后，构造中的每一质点皆与其相同的质点重合，整个构造自相重合。

滑移面是晶体构造中一个假想的平面。当构造对此平面反映并平行平面移动一段距离后，构造中的每一质点皆与其相同的质点重合，整个构造自相重合。

晶体内部构造的对称要素的符号及其标志列于图 15。

1. 对称轴:

晶体构造中的对称轴与螺旋轴有下列几种:

二次轴 二次轴有两种: 二次对称轴 (2) 和二次螺旋对称轴 (2_1) (参看图 16)。

三次轴 三次轴有三种: 三次对称轴 (3)、右旋三次螺旋轴 (3_1) 和左旋三次螺旋轴 (3_2)。(3_1) 表示当逆时针旋转时向上的移距 $t=1/3T$, (3_2) 表示当逆时针方向旋转时, 移距 $t=2/3T$ (顺时针旋转时, 向上的移距仍为 $1/3T$) (参看图 17)。

四次轴 四次轴有四种: 四次对称轴 (4), 右旋四次螺旋轴 (4_1), 中性四次螺旋轴 (4_2), 左旋四次螺旋轴 (4_3)。三种螺旋轴当逆时针方向旋转时向上的移距分别为 $1/4T$, $2/4T$, $3/4T$ (参看图 18)。

六次轴 六次轴有六种: 六次对称轴 (6), 右旋六次螺旋轴 (6_1 和 6_2), 中性六次螺旋轴 (6_3) 以及左旋六次螺旋轴 (6_4 和 6_5) (参看图 19)。

2. 对称面:

晶体构造中的对称面与滑移面有以下几种 (图 20)。

图 20 中, m 为对称面; 其余皆为滑移面。滑移面 a、b、c 表示其滑移方向分别平行于 X、Y、Z, 它们的移距 t 分别为 $a/2$ 、 $b/2$ 、 $c/2$ 。滑移面 n、d 表示滑动方向是沿晶胞的对角线方向; 而其移

距分别为 $1/2$ 和 $1/4$; 对于 n, 移距 t 等于 $\frac{1}{2}(b+c)$, $\frac{1}{2}(a+c)$ 或 $\frac{1}{2}(a+b)$; 对于 d, 移距 t 等于 $\frac{1}{4}(b+c)$,

$\frac{1}{4}(a+c)$ 或 $\frac{1}{4}(a+b)$ 。

1.3.3 空间群

空间群是晶体内部构造的对称要素的组合, 共有 230 个。这 230 个空间群分别属于 32 个点群。空间群符号中只能把原始的对称要素表示出来, 而把推导出来的其他对称要素略去。结构分析中经常采用的符号有两种, 即国际符号和圣佛利斯符号。

空间群的国际符号由两个部分组成, 符号的第一部分是代表空间格子类型的符号, 用 P、C、I 或 F 表示; 符号的后一部分在形式上是该空间群所属的点群的国际符号, 但在相应位置上换上内部对称要素的符号。如空间群 $Ibam$, 表示: 空间格子为体心格子(I); 空间群所属的点群为 mmm ; 但与 X 轴垂直的对称平面为 b 滑移面, 与 Y 轴垂直的对称平面为 a 滑移面, 与 Z 轴垂直的对称平面为 m 对称面。

空间群的圣佛利斯符号是在其所属的点群的圣佛利斯符号的右上角加一个数字代表一个编号。因此由空间群的圣佛利斯符号不能看出其空间对称要素组合的情况, 只有查表方能知道。

230 个空间群列于附录 1 中。在附录 1 中将 230 个空间群的国际符号完整地列举出来了。至于空间群的圣佛利斯符号可由其点群的圣佛利斯符号推算出来。

为说明空间群的含义, 举一例说明如下。金红石 (TiO_2) 的构造图与构造的对称要素的分布如图 21.a、b 所示。图 21.a 表示金红石构造在 (001) 面上的投影。大球代表氧原子, 小球代表钛原子。球中的数字代表各原子在晶胞中的高度, 以 Z 轴之轴长作为单位长。

其空间格子是四方原始格子, 因为相当点只分布于晶胞的角顶上 (注意, 晶胞的体心也是钛原子, 但这个钛原子与角顶上的钛原子并不相当, 因为在它们周围, 相同的方向上没有相同的质点)。