**空间群及点群理解：**由群的基本定义出发，空间群实际上是一些操作的集合，每一个空间群标记都对应着一些特定群元的集合，这里的每一个群元都对应着一个特定的对称操作，值得注意的是，这种对称操作描述的是晶体的特定属性，但是并不局限或针对于某一个晶体结构，反之，如果某种晶体结构客观上属于某一个空间群，那么也就是说这种晶体结构被赋予或者说其具有了该空间群所对应的各种对称属性，同样的理解也适用于点群操作；

以正交晶系对应的222及mmm两个点群为例说明，假定这两个点群对应的正交晶系均是原始格子，此时如果晶胞中只存在一种原子，那么根据上述两种对称操作加上晶体的空间平移特性，得到的晶体结构应该是完全相同的，但是这并不等同于上述两种对称操作群完全等同，比较容易的区分方法是在晶胞中引入更多的原子，此时再分别按照两种对称操作计算得到所有新原子的位置则会发现，两种对称操作对应的晶体结构不再相同了，但是产生的两种不同的晶体结构却具有相同的格点，因为格点是根据晶体的空间平移特性抽象出来的，也即布拉维格子只考虑晶体的空间平移周期性，并不包括晶体所具有的对称性，同样，上述两种晶体结构也具有同样的晶胞结构属性，即二者的晶胞同属于正交晶系，但是给定晶胞中所有原子的初始位置，经过上述两个空间群各自的所有对称元素要求的对称操作之后得到的所有新原子位置在晶胞中的分布位置则完全不同！

从一个原子及多个原子分别按照上述两种空间群计算所有新原子位置的过程可以看出，正如第一段所言，每一个空间群对应的就是对称操作的集合，是一种属性，给定所有原子的初始位置，按照特定的空间群包含的对称元素进行相应的操作，可以得到一个唯一的晶体结构，但是反过来，从一种特定的晶体结构则无法唯一确定其所对应的对称操作，换句话说，正如第二段中叙述的那样，如果晶胞中只有一个原子，那么按照P222及Pmmm两个空间群操作得到的晶体结构完全相同，这也就是说晶格结构并不能完全反应晶体所具有的对称性，这也就是为什么要在布拉维格子的基础上引入空间群操作来唯一标定晶体结构的原因！

**空间群符号：**空间群国际符号每一个位置都唯一标记特定的对称属性，一下给出每一个位置的符号代表的含义：

第一个字母代表晶胞类型（原始晶胞、面心、体心等）：

P——原始晶胞（primitive）

I——体心晶胞（Body centered）

F——面心晶胞（Face centered）

C——C心晶胞（C-centered）

B——B心晶胞（B-centered）

A——A心晶胞（A-centered）

接下来的三个字母代表沿着特定轴所具有的的对称元素，这些特殊的轴向包括：

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Crystal System | Symmetry Direction | | |
| Primary | Secondary | Tertiary |
| Triclinic | None |  |  |
| Monoclinic | [010] |  |  |
| Orthorhombic | [100] | [010] | [001] |
| Tetragonal | [001] | [100]/[010] | [110] |
| Hexagonal/ Trigonal | [001] | [100]/[010] | [120]/[10] |
| Cubic | [100]/[010]/ [001] | [111] | [110] |

**注：表中的轴向均参照七大晶系标准的坐标轴定义方式，关于这种标准定义方式，详见Pukka PadⅠ——P8-10**

空间群符号中还有标记滑移面与旋移面的记号，关于每一个记号对应的旋移面与滑移面详见Pukka PadⅠ——P6-7，这里指的注意的是，滑移面与旋移面对应的对称操作可以经过变换转化成旋转对称操作！

基于以上所有的规则，产生了230个空间群唯一的一套国际符号！

**Wyckoff Site补充：**Wyckoff Site将空间群按照操作原子坐标能够产生的所有新位置个数进行分类，每一个分类中都包含了若干类似于坐标的对称操作元素，这些对称操作一方面可以按照是相应对称操作的简写来理解（譬如可以将（1x+0y+0z,0x+0y+0z+1/4, 0x+0y+0z+1/4）操作简写成（x,1/4,1/4）），关于这种理解详见Matrices, Mappings and Crystallographic Symmetry一书第四章，这也就是说在Wyckoff Site中每个分类中若干类似于坐标的标记实际上代表的是相应的对称操作，这种理解方式带来了一种理解上的方便，即给定任意的点坐标，理论上可以对其进行对应空间群包含的所有对称操作（即按照上述的简写方式进行相应的对称操作），但是只有这个坐标形式从属的空间群分类可以产生新的坐标位置，而产生的新坐标位置正是该分类中所有对称操作的简写形式，这样就带来了另外一种理解方式，即给定任意一个坐标，只需要按照Wyckoff Site表查询哪一个对称操作的简写形式与该坐标形式对应，那么就可以说该坐标“从属于”该对称操作所从属的那个空间群分类，于是该分类中所有对称操作的简写形式就是该坐标在该空间群下能够产生的所有新位置！这里的第二种理解实际上只是一种形式上的理解，实际上Wyckoff Site空间群分类中的每一个元素对应的还是一种对称操作而并不是坐标，只是按照规定的简写形式相应的对称操作就变成了一种“形式坐标”，这其实也是为什么要采取这种简写方式的原因！

**衍射理论补充：**晶格结构产生衍射在数学上的处理引入了δ函数，这是实验中一个极大衍射强度在数学上的体现，在实际实验过程中，δ函数只是对应一个测量上的极大值，并不会“无穷大”！如果晶体是绝对理想的无限延伸的完美晶体，仪器也不存在漂移等，总之如果排除其他任何因素进行理想化的实验，那么得到的衍射强度也不会是无穷大，在数学上，将晶格结构写成δ函数形式，对其进行傅里叶变换才得到了同样具有δ函数形式的倒格子，但实际实验中前后两种δ函数形式的信号都是不存在的！如上所述，实际实验中得到的理想情况是，在衍射极大发生的位置会出现相应的信号极大值，如果再考虑晶体尺寸以及残余应力等因素，便可以得到展宽的衍射峰！