CRYSTAL STRUCTURES AND LATTICE PARAMETERS OF ALLOTROPES OF THE ELEMENTS

H. W. King

The crystal structures of the allotropic forms of the elements are presented in terms of the Pearson symbol, the Strukturbericht designation, and the prototype of the structure. The temperatures of the phase transformations are listed in degrees Celsius and the pressures are in the Gpa. A consistent nomenclature is used, whereby all allotropes are labeled by Greek letters. The lattice parameters of the units cells are given in nanometers (nm) and are considered to be accurate to ±2 in the last reported digit.

This compilation is restricted to changes in crystal structures that occur as a result of a change in temperature or pressure. Low-temperature structures are included for the diatomic and rare gases, which show many similarities with respect to the metallic elements. The elements identified with an asterisk (*) have polymorphic structures based on different molecular configurations. The crystal data given for these elements refer to the most stable structure at room temperature.

Reprinted with the permission of ASM International from T.B. Massalski, Ed., *Binary Alloy Phase Diagrams*, ASM International, Metals Park, Ohio, 1986; certain data on rare earth elements were provided by K.A. Gschneidner.

Element	Temperature, °C	Pressure, GPa	Pearson symbol	Space group	Strukturbericht designation	Prototype	Lattice parameters, nm			Comment, *c/a* or α or β
							a	*b*	*c*	
Ac	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*l	Cu	0.5311	…	…	…
Ag	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.40857	…	…	…
αAl	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.40496	…	…	…
βAl	25	>20.5	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.2693	…	0.4398	1.6331
α´Am	25	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A*3´	αLa	0.34681	…	1.1241	2*1.621
αAm	>769	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.4894	…	…	…
βAm	>1074	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	?	…	…	…
γAm	25	>15	*oC4*	*Cmcm*	*A*20	αU	0.3063	0.5968	0.5169	…
αAr	<-189.35	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.5316	…	…	…
(βAr)	<-189.40	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.3760	…	0.6141	1.633
αAs	25	atm	*hR2*	$R\bar{3}m$	*A*7	αAs	0.41319	…	.....	α = 54.12°
ϵAs	>448	atm	*oC8*	*Cmca*	…	P(black)	0.362	1.085	0.448	…
Au	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.40782	…	…	…
βB	25	atm	*hR*105	*R3m*	…	βB	1.017	…	…	α = 65.12°
αBa	25	atm	*cI2*	$Im\bar{3}m$	*A*2	W	0.50227	…	…	…
βBa	25	>5.33	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.3901	…	0.6154	1.5775
γBa	25	>23	*?*	*?*	…	…	…	…	…	…
αBe	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.22859	…	0.35845	1.5681
βBe	>1270	atm	*cI2*	$Im\bar{3}m$	*A*2	W	0.25515	…	…	…
γBe	25	>9.3	*?*	…	…	…	…	…	…	…
αBi	25	atm	*hR2*	$r\bar{3}m$	*A*7	αAs	0.47460	…	…	α = 57.23°
βBi	25	>2.6	*mC4*	*C2/m*	…	βBi	0.6674	0.6117	0.3304	β = 110.33°
γBi	25	>3.0	*mP3*	*?*	…	…	0.605	0.42	0.465	β = 85.33°
σBi	25	>4.3	*?*	*?*	…	…	…	…	…	…
ϵBi	25	>6.5	*?*	*?*	…	…	…	…	…	…
ζBi	25	>9.0	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.3800	…	…	…
αBk	25	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A*3´	αLa	0.3416	…	1.1069	2*1.620
βBk	>977	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.4997	…	…	…
Br	<7.25	atm	*oC8*	*Cmca*	…	Cl	0.668	0.449	0.874	…
C (graphite)	25	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A*9	C (graphite)	0.24612	…	0.6709	2.7258
C (diamond)	25	>60	*cF8*	*Fd3m*	*A*4	C (diamond)	0.35669	…	…	…
C (hd)	25	HP	*hP4*	$P6_3/mmc$	…	C (hd)	0.2522	…	0.4119	1.633
αCa	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.55884	…	…	…
βCa	>443	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.4480	…	…	…
γCa	25	>1.5	*?*	…	…	…	…	…	…	…
Cd	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.29793	…	0.56196	1.8862
αCe	<-177	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.485	…	…	…
βCe	25	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A*3´	αLa	0.36810	…	1.1857	2*1.611
γCe	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.51610	…	…	…
δ-Ce	>726	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.412	…	…	…
α´Ce	25	>5.4	*oC4*	*Cmcm*	*A*20	αU	0.3049	0.5998	0.5215	…

Element	Temperature, °C	Pressure, GPa	Pearson symbol	Space group	Strukturbericht designation	Prototype	Lattice parameters, nm			Comment, *c/a* or α or β
							a	*b*	*c*	
αCf	25	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A*3′	αLa	0.339	…	1.1015	2*1.625
βCf	>590	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	?	…	…	…
Cl	<-102	atm	*oC8*	*Cmca*	…	Cl	0.624	0.448	0.826	…
αCm	25	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A*3′	αLa	0.3496	…	1.1331	2*1.621
βCm	>1277	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.4382	…	…	…
ϵCo	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.25071	…	0.40686	1.6228
αCo	>422	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.35447	…	…	…
αCr	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.28848	…	…	…
α′Cr	25	HP	*tI2*	*I4/mmm*	…	α′Cr	0.2882	…	0.2887	1.002
aCs	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.6141	…	…	…
βCs	25	>2.37	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.6465	…	…	…
β′Cs	25	>4.22	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.5800	…	…	…
γCs	25	>4.27	*?*	…	…	…	…	…	…	…
Cu	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.36146	…	…	…
α′Dy	<-187	atm	*oC4*	*Cmcm*	…	α′Dy	0.3595	0.6184	0.5678	…
αDy	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.35915	…	0.56501	1.5732
βDy	>1381	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.403	…	…	…
γDy	25	>7.5	*hR3*	$R\bar{3}m$	…	αSm	0.3436	…	2.483	4.5*1.606
Er	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.35592	…	0.55850	1.5692
αEs	25	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A*3′	αLa	?	…	…	…
βEs	?	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	?	…	…	…
Eu	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.45827	…	…	…
αF	<-227.6	atm	*mC8*	*C2/c*	…	αF	0.550	0.338	0.728	β = 102.17°
βF	<-219.67	atm	*cP16*	*Pm3n*	…	γO	0.667	…	…	…
αFe	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.28665	…	…	…
γFe	>912	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.36467	…	…	…
σFe	>1394	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.29315	…	…	…
ϵFe	25	>13	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.2468	…	0.396	1.603
αGa	25	atm	*oC8*	*Cmca*	*A*11	αGa	0.45186	0.76570	0.45258	…
βGa	25	>1.2	*tI2*	*I4/mmm*	*A*6	In	0.2808	…	0.4458	1.588
γGa	-53	>3.0	*oC40*	*Cmcm*	…	γGa	1.0593	1.3523	0.5203	…
αGd	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.36336	…	0.57810	0.5910
βGd	>1235	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.406	…	…	…
γGd	25	>3.0	*hR3*	*R3m*	…	αSm	0.361	…	2.603	4*1.60
αGe	25	atm	*cF8*	*Fd3m*	*A*4	C (diamond)	0.56574	…	…	…
βGe	25	>12	*tI4*	$I4_1/amd$	*A*5	βSn	0.4884	…	0.2692	0.551
γGe	25	>12→atm	*tP12*	$P4_12_12$	…	σGe	0.593	…	0.698	1.18
σGe	LT	>12	*cI16*	*Im3m*	…	γSi	0.692	…	…	…
αH	<-271.9	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.5338	…	…	…
βH	<-259.34	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.3776	…	0.6162	1.632
αHe	<-268.94	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.3555	…	0.5798	1.631
βHe	>-258	0.125	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.4240	…	…	…
γHe	<-271.47	0.03	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.4110	…	…	…
αHf	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.31946	…	0.50510	1.5811
βHf	>1995	atm	*cl2*	*Im3m*	*A*2	W	0.3610	…	…	…
αHg	<-38.84	atm	*hR1*	$R\bar{3}m$	*A*10	αHg	0.3005	…	…	α = 70.53°
βHg	<-194	HP	*tI2*	*I4/mmm*	…	βHg	0.3995	…	0.2825	0.707
γHg	<-194	c.w.	*hR1*	*?*	…	…	…	…	…	…
αHo	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.35778	…	0.56178	1.5702
βHo	25	>7.5	*hR3*	$R\bar{3}m$	…	αSm	0.334	…	2.45	4.5*1.63
I	25	atm	*oC8*	*Cmca*	…	Cl	0.72697	0.47903	0.97942	…
In	25	atm	*tI2*	*I4/mmm*	*A*6	In	0.3253	…	0.49470	1.5210
Ir	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.38392	…	…	…
K	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.5321	…	…	…
Kr	<-157.39	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.5810	…	…	…
αLa	25	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A*3′	αLa	0.37740	…	1.2171	2*1.6125
βLa	>310	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.5303	…	…	…
γLa	>865	atm	*cI2*	*Im3m*	*A*2	W	0.426	…	…	…
β′La	25	>2.0	*cF4*	*Fm3m*	*A*1	Cu	0.517	…	…	…
αLi	<-193	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A*3	Mg	0.3111	…	0.5093	1.637

Element	Temperature, °C	Pressure, GPa	Pearson symbol	Space group	Strukturbericht designation	Prototype	Lattice parameters, nm			Comment, *c/a* or α or β
							a	*b*	*c*	
βLi	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.35093	…	…	…
γLi	<-201	c.w.	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.4388	…	…	…
Lu	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.35052	…	0.55494	1.5832
Mg	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.32094	…	0.52107	1.6236
αMn	25	atm	cl58	$I\bar{4}3m$	*A12*	αMn	0.89126	…	…	…
βMn	>710	atm	*cP20*	$P4_132$	*A13*	βMn	0.63152	…	…	…
γMn	>1079	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.3860	…	…	…
σMn	>1143	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.3080	…	…	…
Mo	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.31470	…	…	…
αN	<-237.6	atm	*cP8*	*Pa3*	…	αN	0.5661	…	…	…
βN	<-210.00	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	…	βN	0.4050	…	0.6604	1.631
γN	<-253	>3.3	*tP4*	$P4_2/mnm$	…	γN	0.3957	…	0.5109	1.291
αNa	<-233	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.3767	…	0.6154	1.634
βNa	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.42906	…	…	…
Nb	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.33004	…	…	…
αNd	25	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A3´*	αLa	0.36582	…	1.17966	2*1.6124
βNd	>863	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.413	…	…	…
γNd	25	>5.0	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.480	…	…	…
Ne	<-243.59	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.4462	…	…	…
Ni	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.35240	…	…	…
αNp	25	atm	*oP8*	*Pnma*	A_c	αNp	0.6663	0.4723	0.4887	…
βNp	>280	atm	*tP4*	$P42_12$	A_d	βNp	0.4883	…	0.3389	0.694
γNp	>576	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.352	…	…	…
αO	<-243.3	atm	*mC4*	*C2m*	…	αO	0.5403	0.3429	0.5086	β = 132.53°
βO	<-229.6	atm	*hR2*	$R\bar{3}m$	…	βO	0.4210	…	…	α = 46.27°
γO	<-218.79	atm	*cP16*	*Pm3n*	…	γO	0.683	…	…	…
Os	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.27341	…	0.43918	1.6063
P (black)	25	atm	*oC8*	*Cmca*	…	P (black)	0.33136	1.0478	0.43763	…
αPa	25	atm	*tI2*	*I4/mmm*	A_a	αPa	0.3921	…	0.3235	0.825
βPa	>1170	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.381	…	…	…
αPb	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.49502	…	…	…
βPb	25	>10.3	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.3265	…	0.5387	1.650
Pd	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.38903	…	…	…
αPm	25	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A3´*	αLa	0.365	…	1.165	2*1.60
βPm	>890	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	(0.410)	…	…	…
αPo	25	atm	*cP1*	*Pm3m*	A_h	αPo	0.3366	…	…	…
βPo	>54	atm	*hR1*	$R\bar{3}m$	…	βPo	0.3373	…	…	α = 98.08°
αPr	25	atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A3´*	αLa	0.36721	…	1.18326	2*1.6111
βPr	>795	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.413	…	…	…
γPr	25	>4.0	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.488	…	…	…
Pt	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.39236	…	…	…
αPu	25	atm	*mP16*	$P2_1/m$	…	αPu	0.6183	0.4822	1.0963	β = 101.97°
βPu	>125	atm	*mI34*	*I2/m*	…	βPu	0.9284	1.0463	0.7859	β = 92.13°
γPu	>215	atm	*oF8*	*Fddd*	…	γPu	0.31587	0.57682	1.0162	…
σPu	>320	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.46371	…	…	…
σ´Pu	>463	atm	*tI2*	*I4/mmm*	*A6*	In	0.33261	…	0.44630	1.3418
ϵPu	>483	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.36343	…	…	…
Ra	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.5148	…	…	…
αRb	25	atm	*cI2*	*lm3m*	*A2*	W	0.5705	…	…	…
βRb	25	>1.08	*?*	…	…	…	…	…	…	…
γRb	25	>2.05	*?*	…	…	…	…	…	…	…
Re	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.27609	…	0.4458	1.6145
Rh	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.38032	…	…	…
Ru	25	atm	hP2	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.27058	…	0.42816	1.5824
αS	25	atm	*oF128*	*Fddd*	*A16*	αS	1.0464	1.28660	2.44860	…
αSb	25	atm	*hR2*	$R\bar{3}m$	*A7*	αAs	0.45067	…	…	α = 57.11°
βSb	25	>5.0	*cP1*	*Pm3m*	A_h	αPo	0.2992	…	…	…
γSb	25	>7.5	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.3376	…	0.5341	1.582
σSb	25	>14.0	*mP3*	*?*	…	…	0.556	0.404	0.422	β = 86.0°
αSc	25	atm	*hP2*	$P6_3/mm$	*A3*	Mg	0.33088	…	0.52680	1.5921

Element	Temperature, °C	Pressure, GPa	Pearson symbol	Space group	Strukturbericht designation	Prototype	Lattice parameters, nm			Comment, *c/a* or α or β
							a	*b*	*c*	
βSc	>1337	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	(0.373)	…	…	…
γSe	25	atm	*hP3*	$P3_121$	*A8*	γSe	0.43659	…	0.49537	1.1346
αSi	25	atm	*cF8*	*Fd3m*	*A4*	C (diamond)	0.54306	…	…	…
βSi	25	>9.5	*tI4*	$I4_1/amd$	*A5*	βSn	0.4686	…	0.2585	0.552
γSi	25	>16.0	*cI16*	*Im3m*	…	γSi	0.6636	…	…	…
σSi	25	>16→atm	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A3′*	αLa	0.380	…	0.628	1.653
αSm	25	atm	*hR3*	$R\bar{3}m$	…	αSm	0.36290	…	2.6207	4*1.6048
βSm	>734	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.36630	…	0.58448	1.5956
γ′Sm	>922	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	(0.410)	…	…	…
σSm	25	>4.0	*hP4*	$P6_3/mmc$	*A3′*	αLa	0.3618	…	1.166	2*1.611
αSn	<13	atm	*cF8*	*Fd3m*	*A4*	C (diamond)	0.64892	…	…	…
βSn	25	atm	*tI4*	$I4_1/amd$	*A5*	βSn	0.58318	…	0.31818	0.5456
γSn	25	>9.0	*tI2*	*?*	…	γSn	0.370	…	0.337	0.91
αSr	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.6084	…	…	…
βSr	>547	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.487	…	…	…
β′Sr	25	>3.5	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.4437	…	…	…
Ta	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.33030	…	…	…
α′Tb	<-53	atm	*oC4*	*Cmcm*	…	α′Dy	0.3605	0.6244	0.5706	…
aTb	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.36055	…	0.56966	1.5800
βTb	>1289	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	(0.407)	…	…	…
γTb	25	>6.0	*hR3*	$R\bar{3}m$	…	αSm	0.341	…	2.45	4*1.60
Tc	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.2738	…	0.4393	1.604
αTe	25	atm	*hP3*	$P3_121$	*A8*	γSe	0.44566	…	0.59264	1.3298
βTe	25	>2.0	*hR2*	$R\bar{3}m$	*A7*	αAs	0.469	…	…	α = 53.30°
γTe	25	>7.0	*hR1*	$R\bar{3}m$	…	βPo	0.3002	…	…	α = 103.3°
αTh	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.50842	…	…	…
βTh	>1360	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.411	…	…	…
αTi	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.29506	…	0.46835	1.59873
βTi	>882	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.33065	…	…	…
ωTi	25	HP→atm	*hP3*	*P6/mmm*	…	ωTi	0.4625	…	0.2813	0.6082
αTl	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.34566	…	0.55248	1.5983
βTl	>230	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.3879	…	…	…
γTl	25	HP	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	?	…	…	…
Tm	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.35375	…	0.55540	1.5700
αU	25	atm	*oC4*	*Cmcm*	*A20*	αU	0.28537	0.58695	0.49548	…
βU	>668	atm	*tP30*	$P4_2/mnm$	A_b	βU	1.0759	…	0.5656	0.526
γU	>776	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.3524	…	…	…
V	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.30240	…	…	…
W	25	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.31652	…	…	…
Xe	<-111.76	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.6350	…	…	…
αY	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.36482	…	0.57318	1.5711
βY	>1478	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	(0.410)	…	…	…
αYb	<-3	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.38799	…	0.63859	1.6459
βYb	25	atm	*cF4*	*Fm3m*	*A1*	Cu	0.54848	…	…	…
γYb	>795	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.444	…	…	…
Zn	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.26650	…	0.49470	1.8563
αZr	25	atm	*hP2*	$P6_3/mmc$	*A3*	Mg	0.32316	…	0.51475	1.5929
βZr	>863	atm	*cI2*	*Im3m*	*A2*	W	0.36090	…	…	…
ωZr	25	HP→atm	*hP2*	*P6/mmm*	…	ωTi	0.5036	…	0.3109	0.617