

Space Group Frequencies in the Structural Databases (1997)

Space Group Frequencies. Table of the percentage of Organic/organometallic (C-H), Inorganic (M-M) and Protein (PDB) structure space group frequencies in the Cambridge Crystallographic Database(1997) [Allen, F.H., Kennard, O. Chemical Design Automation News (1993) **8**, 31-37; Wilson A.J.C. (1988) **A44**, 715-724], the Inorganic Crystal Structure Data Base [Baur, W.H. & Kassner, D. Acta Cryst. (1992) **B48**, 356-369] and the Brookhaven Protein Data Base (6129 entries compiled by Axel Brunger, Yale University, 1997) respectively. All results in percentage of structures with the given space group in the given data base.

Joseph H. Reibenspies, Ph.D. : mail inquires to j-reibenspies@tamu.edu

Department of Chemistry, Texas A & M University, Copyright 1997

#	Space Group	C-H%	M-M%	PDB%
1	P1	0.97	0.4	2.3
2	P-1	19.318	4.3	-
3	P2	0.028	0.04	0.08
4	P2 ₁	5.656	0.64	15.6
5	C2	0.813	0.45	8.9
6	Pm	0.003	0.04	-
7	Pc	0.367	0.21	-
8	Cm	0.06	0.23	-
9	Cc	0.999	0.70	-
10	P2/m	0.025	0.2	-
11	P2 ₁ /m	0.675	1.3	-
12	C2/m	0.515	3.4	-

13	P2/c	0.507	0.6	-
14	P2 ₁ /c	35.177	8.1	-
15	C2/c	7.159	3.8	-
16	P222	0.01	0.04	0
17	P222 ₁	0.022	0.05	0.03
18	P2 ₁ 2 ₁ 2	0.47	0.17	6.3
19	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	9.013	1.1	23.9
20	C222 ₁	0.199	0.15	4.2
21	C222	0.012	0.05	0.08
22	F222	0.003	0.02	0.07
23	I222	0.023	0.02	2.4
24	I2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	0.006	0.005	0.07
25	Pmm2	0.006	0.04	-
26	Pmc2 ₁	0.026	0.16	-
27	Pcc2	0.005	0	-
28	Pma2	0.002	0.05	-
29	Pca2 ₁	0.725	0.31	-
30	Pnc2	0.02	0.02	-
31	Pnm2 ₁	0.097	0.42	-
32	Pba2	0.022	0.07	-
33	Pna2 ₁	1.527	1.06	-
34	Pnn2	0.036	0.07	-
35	Cmm2	0.001	0.02	-

36	Cmc2 ₁	0.166	0.7	-
37	Ccc2	0.017	0.008	-
38	Amm2	0.006	0.15	-
39	Abm2	0.007	0.025	-
40	Ama2	0.022	0.11	-
41	Aba2	0.094	0.11	-
42	Fmm2	0.014	0.03	-
43	Fdd2	0.333	0.35	-
44	Imm2	0.01	0.14	-
45	Iba2	0.074	0.005	-
46	Ima2	0.013	0.08	-
47	Pmmm	0.005	0.61	-
48	Pnnn	0.006	0.005	-
49	Pccm	0.002	0.005	-
50	Pban	0.007	0.03	-
51	Pmma	0.01	0.16	-
52	Pnna	0.079	0.14	-
53	Pmna	0.017	0.08	-
54	Pcca	0.041	0.08	-
55	Pbam	0.036	0.76	-
56	Pccn	0.354	0.14	-
57	Pbcm	0.139	0.35	-
58	Pnnm	0.083	0.78	-

59	Pmmn	0.05	0.34	-
60	Pbcn	0.897	0.76	-
61	Pbca	3.776	1.3	-
62	Pnma	1.537	3.2	-
63	Cmcm	0.133	1.85	-
64	Cmca	0.168	0.62	-
65	Cmmm	0.013	0.29	-
66	Cccm	0.013	0.13	-
67	Cmma	0.009	0.06	-
68	Ccca	0.038	0.08	-
69	Fmmm	0.011	0.14	-
70	Fddd	0.087	0.32	-
71	Immm	0.009	0.54	-
72	Ibam	0.053	0.28	-
73	Ibca	0.023	0.04	-
74	Imma	0.011	0.40	-
75	P4	0.007	0.05	0.11
76	P4 ₁	0.118	0.06	1.1
77	P4 ₂	0.011	0.02	0.11
78	P4 ₃	0.051	0.01	0.69
79	I4	0.025	0.05	0.33
80	I4 ₁	0.027	0.01	0.16
81	P-4	0.027	0.03	-

82	I-4	0.159	0.43	-
83	P4/m	0.01	0.05	-
84	P42/m	0.019	0.05	-
85	P4/n	0.101	0.17	-
86	P42/n	0.136	0.17	-
87	I4/m	0.061	0.42	-
88	I4 ₁ /a	0.322	0.52	-
89	P422	0.003	0.002	0.07
90	P4 ₂ 2	0.009	0.01	0.34
91	P4 ₁ 22	0.009	0.01	0.08
92	P4 ₁ 2 ₁ 2	0.264	0.25	3.1
93	P4 ₂ 22	0.002	0	0.03
94	P4 ₂ 2 ₁ 2	0.023	0.04	1.0
95	P4 ₃ 22	0.002	0.01	0.15
96	P4 ₃ 2 ₁ 2	0.127	0.08	5.20
97	I422	0.006	0.03	0.51
98	I4 ₁ 22	0.006	0.01	0.59
99	P4mm	0.001	0.25	-
100	P4bm	0.001	0.08	-
101	P4 ₂ cm	0.002	0	-
102	P4 ₂ nm	0.005	0.04	-
103	P4cc	0.001	0.02	-
104	P4nc	0.015	0	-

105	P4 ₂ mc	0.001	0.01	-
106	P4 ₂ bc	0.008	0.005	-
107	I4mm	0.004	0.08	-
108	I4cm	0.004	0.04	-
109	I4 ₁ md	0.009	0.06	-
110	I4 ₁ cd	0.039	0.04	-
111	P-42m	0.002	0.06	-
112	P-42c	0.003	0.02	-
113	P-42 ₁ m	0.038	0.27	-
114	P-42 ₁ c	0.143	0.12	-
115	P-4m2	0.001	0.02	-
116	P-4c2	0.002	0.02	-
117	P-4b2	0.006	0.05	-
118	P-4n2	0.026	0.05	-
119	I-4m2	0.005	0.06	-
120	I-4c2	0.013	0.04	-
121	I-42m	0.029	0.30	-
122	I-42d	0.055	0.66	-
123	P4/mmm	0.017	0.74	-
124	P4/mcc	0.02	0.05	-
125	P4/nbm	0.003	0.001	-
126	P4/nnc	0.022	0.002	-
127	P4/mbm	0.027	0.51	-

128	P4/mnc	0.013	0.24	-
129	P4/nmm	0.042	1.0	-
130	P4/ncc	0.041	0.14	-
131	P4 ₂ /mmc	0.003	0.05	-
132	P4 ₂ /mcm	0.002	0.004	-
133	P4 ₂ /nbc	0.004	0.004	-
134	P4 ₂ /nnm	0.009	0.05	-
135	P4 ₂ /mbc	0.009	0.16	-
136	P4 ₂ /mnm	0.025	0.80	-
137	P4 ₂ /mnc	0.016	0.11	-
138	P4 ₂ /ncm	0.009	0.04	-
139	I4/mmm	0.018	2.4	-
140	I4/mcm	0.006	0.98	-
141	I4 ₁ /amd	0.021	0.96	-
142	I4 ₁ /acd	0.042	0.16	-
143	P3	0.034	0.10	0.10
144	P3 ₁	0.081	0.08	0.24
145	P3 ₂	0.061	0.01	0.59
146	R3	0.148	0.25	1.27
147	P-3	0.094	0.20	-
148	R-3	0.485	1.4	-
149	P3 ₁₂	0.001	0.04	0.02
150	P3 ₂₁	0.006	0.22	0.67

151	P3 ₁ 12	0.001	0.03	0.03
152	P3 ₁ 21	0.111	0.42	3.7
153	P3 ₂ 12	0.002	0.001	0.11
154	P3 ₂ 21	0.053	0.08	7.33
155	R32	0.043	0.19	1.19
156	P3m1	0.002	0.20	-
157	P31m	0.003	0.09	-
158	P3c1	0.011	0.02	-
159	P31c	0.023	0.13	-
160	R3m	0.039	0.64	-
161	R3c	0.136	0.28	-
162	P-31m	0.001	0.16	-
163	P-31c	0.032	0.14	-
164	P-3m1	0.02	1.69	-
165	P-3c1	0.047	0.25	-
166	R-3m	0.041	2.48	-
167	R-3c	0.111	1.32	-
168	P6	0.004	0.002	1.06
169	P6 ₁	0.061	0.05	1.31
170	P6 ₅	0.043	0.02	0.64
171	P6 ₂	0.007	0.001	0.03
172	P6 ₄	0.004	0	0.05
173	P6 ₃	0.075	0.54	0.47

174	P-6	0.005	0.29	-
175	P6/m	0.003	0.05	-
176	P6 ₃ /m	0.16	1.2	-
177	P622	0.001	0.05	0.05
178	P6 ₁ 22	0.022	0.004	2.12
179	P6 ₅ 22	0.01	0	0.73
180	P6 ₂ 22	0.005	0.19	0.34
181	P6 ₄ 22	0.005	0.05	0.31
182	P6 ₃ 22	0.008	0.10	0.59
183	P6mm	0.002	0	-
184	P6cc	0	0.001	-
185	P6 ₃ cm	0.003	0.13	-
186	P6 ₃ mc	0.029	0.83	-
187	P-6m2	0	0.14	-
188	P-6c2	0.002	0.08	-
189	P-62m	0.005	0.68	-
190	P-62c	0.015	0.11	-
191	P6/mmm	0.007	1.4	-
192	P6/mcc	0.009	0.19	-
193	P6 ₃ /mcm	0.002	0.66	-
194	P6 ₃ /mmc	0.026	3.91	-
195	P23	0.003	0.05	0.02
196	F23	0.005	0.11	0.02

197	I23	0.01	0.12	0.33
198	P2 ₁ 3	0.069	0.47	0.95
199	I2 ₁ 3	0.002	0.13	0.39
200	Pm-3	0.004	0.08	-
201	Pn-3	0.005	0.11	-
202	Fm-3	0.004	0.10	-
203	Fd-3	0.008	0.10	-
204	Im-3	0.007	0.29	-
205	Pa-3	0.115	0.61	-
206	Ia-3	0.007	0.12	-
207	P432	0.001	0.002	0.02
208	P4 ₂ 32	0	0.10	0.05
209	F432	0.001	0.01	0.38
210	F4 ₁ 32	0.003	0.01	0.13
211	I432	0.001	0.05	0.18
212	P4 ₃ 32	0.003	0.10	0.03
213	P4 ₁ 32	0.006	0.05	0.07
214	I4 ₁ 32	0	0.05	0.10
215	P-43m	0.011	0.25	-
216	F-43m	0.014	1.01	-
217	I-43m	0.028	0.41	-
218	P-43n	0.019	0.25	-
219	F-43c	0.011	0.07	-

220	I-43d	0.019	0.28	-
221	Pm-3m	0.012	1.58	-
222	Pn-3n	0.007	0.008	-
223	Pm-3n	0.006	0.15	-
224	Pn-3m	0.003	0.008	-
225	Fm-3m	0.033	4.4	-
226	Fm-3c	0.001	0.08	-
227	Fd-3m	0.019	3.0	-
228	Fd-3c	0.008	0.05	-
229	Im-3m	0.021	0.26	-
230	Ia-3d	0.002	0.72	-