Acta Cryst. (1949). **2**, 263

Die vollständige und eindeutige Kennzeichnung der Raumsysteme durch Charakterentafeln. I.

VON PAUL NIGGLI

Mineralogisches Institut der E.T.H., Zürich, Schweiz

(*Eingegangen am* 20. *Februar* 1949)

Space groups can be given a novel representation by means of tables of characters having the form of square matrices. These tables constitute the simplest formulation of all essential properties of the space groups (e.g. elements of symmetry, point symmetry, the general and special position of equivalent points, the structure factor for the general position, the laws of missing spectra, the lattice complexes, the laws of transformation, etc.). They offer a substitute for the descriptive part of the theory of groups and crystal structures, and play in crystal physics a role similar to that of the tables of characters used in molecular spectroscopy.

The derivation and explanation of these tables is exemplified in this first communication by a discussion of the space groups isomorphous with C_1, C_i, C_2, C_s, C_{2h}, D_2, C_{2v}, D_{2h} possessing simply primitive translation groups.

Bei der Ableitung von Charakterentafeln der Schwingungssysteme für Molekül- und Kristallspektroskopie (Niggli, 1949*a*, *b*, *c*) tauchte der Gedanke auf, in analoger Weise *Charakterentafeln der Raumsysteme* aufzustellen. Diese Charakterentafeln ersetzen den gesamten deskriptiven Teil der Darstellung eines Raumsystemes und geben darüber hinaus unmittelbar über weitere Gesetzmässigkeiten Auskunft. Die gruppentheoretischen Tafeln der *Internationalen Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen* lassen sich somit heute durch weit übersichtlichere, im Umfang sehr stark reduzierte Zusammenstellungen ersetzen. Ausserdem ergibt sich eine Ableitung der Zahl der Raumsysteme auf dem gleichen Wege wie bei der Berechnung von Isomerenzahlen (Niggli, 1946, 1947). Die hier nicht angegebenen Beweise stützen sich auf bereits vor 30 Jahren in der *Geometrischen Kristallographie des Diskontinuums* gegebene Sätze und sind völlig elementarer Natur. Aus dem neuartigen Tabellenwerk seien vorerst nur die Verhältnisse der 40 digonalen einfachen Raumsysteme (mit ihren bis mehr als acht verschiedenen Aufstellungen) herausgegriffen, die vollständig in einer Tabelle von maximal zwei Seiten darstellbar sind. Das Prinzip der Konstruktion der expliziten Charakterentafeln ist folgendes.

Werden die Koordinaten eines Punktes x, y, z durch Symmetrieoperationen unmittelbar in $\overset{\pm}{x}, \overset{\pm}{y}, \overset{\pm}{z}$ übergeführt, liegen also Symmetriezentren, Digyren oder Spiegelebenen der Nullpunktschar vor, so sind die Zusatztranslationen $= 0$ oder 2π ($2\pi =$ Identitätsabstand). Die Cosinuswerte dieser Grössen werden als *Charaktere* bezeichnet. Es lauten somit im obigen Falle alle Charaktere $= +1$, da $\cos 0^\circ = 1$.

Treten Zusatztranslationen $\frac{1}{2}$ auf, liegen z.B. die Symmetrieelemente um $\frac{1}{4}a$ oder (und) $\frac{1}{4}b$ bzw. $\frac{1}{4}c$ vom Nullpunkt entfernt, oder sind Gleitspiegelebenen mit einer halben Translation als Gleitkomponenten bzw. digonale Schraubenachsen vorhanden, so gibt dies für die entsprechenden Koordinatenwerte die Charaktere $\cos\pi = \bar{1}$. (Analog lauten, was für andere Raumsysteme wichtig ist, für Zusatzgrössen $\frac{1}{4}$ die Charaktere $\cos\frac{2\pi}{4} = \overset{\pm}{0}$, für Zusatzgrössen $\frac{1}{3}$ also $\cos\frac{2\pi}{3} = \frac{\bar{1}}{2}$ u.s.w.)

Diesen Definitionen gemäss bedeuten für

	$\bar{x}$	y	z	neben $x\ y\ z$
die Charaktere	1	1	1	eine Spiegelebene $(100)_0$ durch den Nullpunkt und die dazugehörige Schar (im folgenden nicht stets vermerkt);
die Charaktere	$\bar{1}$	1	1	eine Spiegelebene $(100)_{\frac{1}{4}}$ in $\frac{1}{4}a$, also $\frac{1}{4}, y, z$;
die Charaktere	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	eine Gleitspiegelebene c in $(100)_{\frac{1}{4}}$, d.h. in $\frac{1}{4}a$ mit Gleitkomponente $\frac{1}{2}c$.

Es sind in diesen Tripeln die Charaktere der ersten Koordinate für die *Lage* der Symmetrieebene und die Charaktere der zwei weiteren Koordinaten für die *Art* der Symmetrieebene (Spiegelebene oder Gleitspiegelebene) kennzeichnend (1,1 wenn Spiegelebene). Für die (100) Ebenen nennen wir daher die auf y, z bezüglichen Charaktere die Hauptcharaktere oder s-Charaktere.

Es bedeuten für

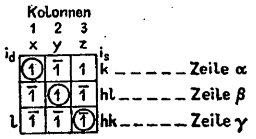
	x	$\bar{y}$	$\bar{z}$	
die Charaktere	1	1	1	Digyrenschar [100] durch Nullpunkt;
die Charaktere	$\bar{1}$	1	1	Helicogyrenschar [100] durch Nullpunkt;
die Charaktere	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	Digyrenschar [100] durch Punkt $0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$, also $x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$, u.s.w.

Hier wird der auf die Koordinate der Achsenrichtung bezügliche Charakter Hauptcharakter der Achse = d-Charakter genannt.

Infolge der Symmetriesätze gilt, dass bei Wahl eines Symmetriezentrums als Nullpunkt die Charaktere

von [100] als Symmetrieachse zugleich die von (100) als Symmetrieebene,
von [010] als Symmetrieachse zugleich die von (010) als Symmetrieebene,
von [001] als Symmetrieachse zugleich die von (001) als Symmetrieebene

sind. Da wir für ein Raumsystem D_{2h}^q das Symmetriezentrum zum Nullpunkt wählen, gehört bei einfach primitiver Translationsgruppe von vornherein zu x, y, z zunächst $\bar{x}$, $\bar{y}$, $\bar{z}$. Die restliche Charakterentafel bekommt dann die Form einer quadratischen Matrix mit den Charakteren der Symmetrieebenen und Symmetrieachsen in der Reihenfolge (100) bzw. [100], (010) bzw. [010], (001) bzw. [001]. So ist nachfolgende Charakterentafel dem Raumsystem D_{2h}^6 als *Pbnn* isomorph.*



Die Zahlen in den Kreisen bezeichnen die charakteristische Koordinate senkrecht zu der Symmetrieebene bzw. parallel der Symmetrieachse. Es sind zugleich die d-Charaktere. Aus dieser Charakterentafel liest man sofort ab:

(100) durch Nullpunkt (Symmetriezentrum) ist Gleitspiegelebene b mit $\frac{1}{2}b$ als Gleitkomponente, also C_s^2;

[100] durch Punkt 0, $\frac{1}{4}$, 0 = *Digyre* $[100]_{\frac{1}{4}0} = x, \frac{1}{4}, 0$, also C_2^1;

(010) durch Nullpunkt = Gleitspiegelebene n mit Gleitkomponente $\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}c$, also C_s^2;

[010] durch $\frac{1}{4}$, 0, $\frac{1}{4}$ = *Digyre* $[010]_{\frac{1}{4}\frac{1}{4}} = \frac{1}{4}, y, \frac{1}{4}$;

(001) durch 0, 0, $\frac{1}{4}$ = Gleitspiegelebene n mit Gleitkomponente $\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b$, also C_s^2;

[001] durch $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$, 0 = Schraubenachse 2_1 $[001]_{\frac{1}{4}\frac{1}{4}} = \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z$, also C_2^2.

Es sind stets die ganzen Scharen bestimmt, zu $(100)_0$ gehört $(100)_{\frac{1}{2}}$, zu $[100]_{\frac{1}{4}0}$ $[100]_{\frac{3}{4}0}$ $[100]_{\frac{1}{4}\frac{1}{2}}$ $[100]_{\frac{3}{4}\frac{1}{2}}$, u.s.w.

Jedes digonale Raumsystem mit einfacher Translationsgruppe und bestimmter Stellung ist *eindeutig* einer solchen neungliedrigen quadratischen Matrix zugeordnet mit +1 (kurzweg 1) und $\bar{1}$ als d- und s-Charakteren. Aus Symmetriegründen gilt, dass bei orthorhombischer Symmetrie in einer Vertikalkolonne keine oder aber zwei Minuszeichen auftreten.

* Die ausserhalb des Quadrats stehenden Zeichen, 'Zusatzindices', werden weiter unten erläutert.

Bezeichnen wir die Zeilen mit α, β, γ so entsprechen ohne Zusatztranslation

	D_{2h}	D_2	C_{2v} (Normalstellung)
Zeile α	$\begin{cases}\bar{x} & y & z\\ x & \bar{y} & \bar{z}\end{cases}$	$x\ \ \bar{y}\ \ \bar{z}$	$\bar{x}\ \ y\ \ z$
Zeile β	$\begin{cases}x & \bar{y} & z\\ \bar{x} & y & \bar{z}\end{cases}$	$\bar{x}\ \ y\ \ \bar{z}$	$x\ \ \bar{y}\ \ z$
Zeile γ	$\begin{cases}x & y & \bar{z}\\ \bar{x} & \bar{y} & z\end{cases}$	$\bar{x}\ \ \bar{y}\ \ z$	$\bar{x}\ \ \bar{y}\ \ z$

Ist ein $\bar{1}$ statt +1 vorhanden, so erhält die betreffende Koordinate als Zusatztranslation $+\frac{1}{2}$. Dazu kommt x, y, z und, wenn ein Symmetriezentrum vorhanden ist (D_{2h}^q), $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$.

Somit lautet z.B. für die oben hingeschriebene Matrix die unmittelbar ablesbare Punktzusammengehörigkeit bei allgemeiner Lage:

Für D_{2h}^6:

$$x, y, z;\quad \bar{x}, y+\tfrac{1}{2}, z;\quad x+\tfrac{1}{2}, \bar{y}, z+\tfrac{1}{2};\quad x+\tfrac{1}{2}, y+\tfrac{1}{2}, \bar{z}+\tfrac{1}{2};$$
$$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z};\quad x, \bar{y}+\tfrac{1}{2}, \bar{z};\quad \bar{x}+\tfrac{1}{2}, y, \bar{z}+\tfrac{1}{2};\quad \bar{x}+\tfrac{1}{2}, \bar{y}+\tfrac{1}{2}, z+\tfrac{1}{2}.$$

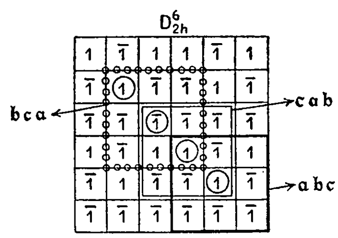
Für C_{2v}^9 als Untergruppe:

$$x, y, z;\quad \bar{x}, y+\tfrac{1}{2}, z;\quad x+\tfrac{1}{2}, \bar{y}, z+\tfrac{1}{2};\quad \bar{x}+\tfrac{1}{2}, \bar{y}+\tfrac{1}{2}, z+\tfrac{1}{2}.$$

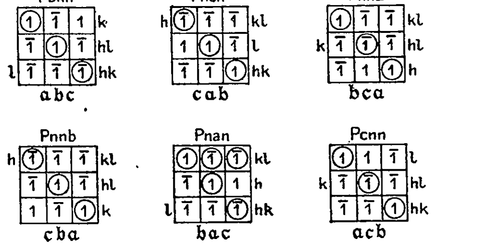
Für D_2^2 als Untergruppe:

$$x, y, z;\quad x, \bar{y}+\tfrac{1}{2}, \bar{z};\quad \bar{x}+\tfrac{1}{2}, y, \bar{z}+\tfrac{1}{2};\quad \bar{x}+\tfrac{1}{2}, \bar{y}+\tfrac{1}{2}, z+\tfrac{1}{2}.$$

$\mathfrak{a}$-Achse (Zeile α), $\mathfrak{b}$-Achse (Zeile β) und $\mathfrak{c}$-Achse (Zeile γ) sind beliebig vertauschbar, was maximal zu 6 verschiedenen Matrizen führen kann. Sie werden nach folgendem Schema erhalten. Man schreibt in einem Grossquadrat viermal die Matrizen auf und erhält die zyklisch vertauschten Aufstellungen durch die in nachstehender Figur markierten Quadrate.



Für jeden dieser Fälle ist die weitere Vertauschung von an erster und an dritter Stelle stehender Achse gegeben durch eine zentrosymmetrische Vertauschung der Charaktere um den β_d-Wert der Charakterentafel. Somit lauten die Charakterentafeln für D_{2h}^6 in allen 6 Stellungen:



Auch für die neuen Stellungen lassen sich die Lagen der Symmetrieelemente und die Koordinaten der Punktzusammengehörigkeiten sofort ablesen genau so, wie das für die Stellung $\mathfrak{abc}$ der Fall war; dabei ist die erste Zeile der neuen $\mathfrak{a}$-Achse, die zweite Zeile der neuen $\mathfrak{b}$-Achse und die dritte Zeile der neuen $\mathfrak{c}$-Achse zugeordnet.

Hauptcharaktere für die D_2^q-Gruppe sind immer die Charaktere der Hauptdiagonale (d-Charaktere). In D_{2h}^6 bedeutet dies $C_2^1 C_2^1 C_2^2 = D_2^2 = 2, 2, 2_1$.

①		
	①	
		$(\bar{1})$

Es ist (wie z.B. in den 6 Fällen von D_2^2, bezogen auf D_{2h}^6) erstens eine Vertauschung von Schrauben- und Drehachsen möglich, zweitens entsprechend verschiedenen Vorzeichen der s-Charaktere verschiedene Nullpunktwahl. Hauptcharaktere für die C_{2v}^q-Gruppen sind: der d-Wert für die Zeile der Symmetrieachse, und die s-Werte für die Zeilen der Symmetrieebenen. Also für D_{2h}^6:

	$\bar{1}$	1
$\bar{1}$		$\bar{1}$
		$(\bar{1})$

$C_{2v} \parallel \mathfrak{c}$-Achse
$\left.\begin{matrix} C_s^2 & C_s^2 & C_2^2 \\ b & n & 2_1 \end{matrix}\right\} C_{2v}^9$

①		
$\bar{1}$		$\bar{1}$
$\bar{1}$	$\bar{1}$	

$C_{2v} \parallel \mathfrak{a}$-Achse
$\left.\begin{matrix} C_s^2 & C_s^2 & C_2^1 \\ n & n & 2 \end{matrix}\right\} C_{2v}^{10}$

	$\bar{1}$	1
	①	
$\bar{1}$	$\bar{1}$	

$C_{2v} \parallel \mathfrak{b}$-Achse
$\left.\begin{matrix} C_s^2 & C_s^2 & C_2^1 \\ b & n & 2 \end{matrix}\right\} C_{2v}^6$

Bei der Vertauschung von D_{2h}^6 muss jede dieser C_{2v}^q-Gruppen zweimal zur C_{2v}^q-Gruppe parallel c werden. Es sind dies für C_{2v}^9 Stellung $\mathfrak{abc}$ und $\mathfrak{bac}$, für C_{2v}^6 Stellung $\mathfrak{acb}$ und $\mathfrak{cab}$, für C_{2v}^{10} Stellung $\mathfrak{bca}$ und $\mathfrak{cba}$.

Hauptcharaktere für die in D_{2h}^6 enthaltenen C_{2h}^q-Gruppen sind die einzelnen Horizontalreihen. Also enthält D_{2h}^6 in Ausgangsaufstellung:

① $\bar{1}$ 1 $= 2/b = C_{2h}^4$ nach $\mathfrak{a}$ Achse
$\bar{1}$ ① $\bar{1}$ $= 2/n = C_{2h}^4$ nach $\mathfrak{b}$ Achse
$\bar{1}$ $\bar{1}$ $(\bar{1})$ $= 2_1/n = C_{2h}^5$ nach $\mathfrak{c}$ Achse

Die Einzelscharen sind schon angegeben. Man liest somit sofort alle Untergruppen aus der Charakterentafel ab. D_{2h}^6 enthält keine Punktlagen der Punktsymmetrie D_{2h}, C_{2h}, C_{2v} oder D_2. D_{2h} als Punktsymmetrie tritt (im Nullpunkt) nur auf, wenn alle Charaktere $+1$ sind. Ein C_{2h} als Punktsymmetrie (ebenfalls im Nullpunkt) ist nur vorhanden, wenn in *einer* Zeile alle Charaktere $+1$ sind,

die oberste Zeile ergibt dann C_{2h} mit Achse [100],
die zweite Zeile ergibt dann C_{2h} mit Achse [010],
die unterste Zeile ergibt dann C_{2h} mit Achse [001].

C_{2v} als Punktsymmetrie tritt nur auf, wenn in einer Zeile (derjenigen, die der Achse entspricht) der d-Charakter $= +1$ ist und in den zwei andern Zeilen die s-Charaktere keine Minuszeichen enthalten.

So wäre in D_{2h}^{13} ein C_{2v} mit $[001]_{\frac{1}{4}\frac{1}{4}} = \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z$ als Digyre vorhanden. Hier treten auch zwei Spiegelebenen $(100)_{\frac{1}{4}}$ und $(010)_{\frac{1}{4}}$, bzw. $\frac{1}{4}, y, z$ und $x, \frac{1}{4}, z$, auf.

D_{2h}^{13}

$(\bar{1})$	1	1
1	$(\bar{1})$	1
$\bar{1}$	$\bar{1}$	①

Die Lage allfälliger D_2-Punkte (bei positiver Hauptdiagonale, d.h. lauter $+d$-Werten) ergibt sich unmittelbar aus den s-Charakteren. So enthalten

D_{2h}^2

①	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\mathfrak{kl}$
$\bar{1}$	①	$\bar{1}$	$\mathfrak{hl}$
$\bar{1}$	$\bar{1}$	①	$\mathfrak{hk}$

D_2-Punkte in $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$
da $\bar{1}$ in x, y, z auftritt

D_{2h}^3

①	1	$\bar{1}$	$\mathfrak{l}$
1	①	$\bar{1}$	$\mathfrak{l}$
1	1	①	

D_2-Punkte in $0, 0, \frac{1}{4}$
da $\bar{1}$ in z auftritt

D_{2h}^4

①	$\bar{1}$	1	$\mathfrak{k}$
$\bar{1}$	①	1	$\mathfrak{h}$
$\bar{1}$	$\bar{1}$	①	$\mathfrak{hk}$

D_2-Punkte in $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0$
da $\bar{1}$ in x, y auftritt

Geometrische Oerter der Mindest-Symmetriebedingung C_2 als Punktsymmetrie sind vorhanden, wenn in D_{2h}^q oder D^q in einer Zeile ein d-Wert positiv ist. Er entspricht der Koordinate in der Achsenrichtung. Die in der gleichen Zeile vorhandenen s-Charaktere bestimmen die übrigen Koordinaten zu $\frac{1}{4}$ wenn $\bar{1}$ steht, zu 0 wenn 1 steht. So ist die Zeile:

1 ① 1 identisch mit $[010]_{00}$ = Digyre, oder mit $0, y, 0$ = Punkten auf einer Digyre,

$\bar{1}$ ① 1 bedeutet $[010]_{\frac{1}{4}0}$ = Digyre bzw. $\frac{1}{4}, y, 0$ = Punkte auf einer Digyre,

oder mit x als d-Wert:

① $\bar{1}$ $\bar{1}$ sagt aus: $x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ = geometrischer Ort von Punkten, die auf einer Digyre liegen.

In C_{2v}^q der Normalaufstellung kommt nur die Zeile γ mit $s\ s$ (d) für diese Deutung in Frage. Eine Spiegelebene ist nur dann durch die Zeilen α, β von D_{2h}^q und C_{2v}^q oder zusätzlich durch die Zeile γ von D_{2h}^q gegeben, wenn in diesen Zeilen die s-Charaktere $+1$ sind. Ein allfälliges $\bar{1}$ für den d-Wert gibt die konstant bleibende Koordinate senkrecht zur Spiegelebene als $\frac{1}{4}$ an.

Somit bedeuten beispielhaft:

in α: $(\bar{1})$ 1 1, dass die Punkte $\frac{1}{4}, y, z$ der Symmetriebedingung C_s gehorchen, zur gleichen Schar gehören natürlich Punkte $\frac{3}{4}, y, z$;

in β: 1 ① 1, dass die Punkte $x, 0, z$ oder $x, \frac{1}{2}, z$ jeweilen Punkte einer Spiegelebene sind, u.s.w.

In orthorhombischen Raumsystemen treten Symmetriezentren definitionsgemäss nur in D_{2h}^q-Raumsystemen im Nullpunkt und in den Punkten $\frac{1}{2}, 0, 0$; $0, \frac{1}{2}, 0$; $0, 0, \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$; $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$; $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ auf. Somit liest man aus einer Charakterentafel weiterhin sofort ab: Die Koordinaten gleichwertiger Punkte beliebiger Lage und die Koordinaten von Punkten bestimmter Symmetriebedingung.

Zur knappen Formulierung allgemein gültiger Regeln wollen wir noch folgende Bezeichnungen einführen:

Die Charaktere mit $\bar{1}$-Werten, die in den Koordinatentripeln mit $\frac{1}{2}$ als Zusatzkomponente verbunden sind, nennen wir auch Zusatzindizes i, wobei h zu x, k zu y, l zu z gehört. Zusatzindizes die zu d-Werten gehören (i_d), geben wir auf der linken Seite, Zusatzindizes, die zu s-Werten gehören (i_s), auf der rechten Seite des Charakterenquadrates an, d.h. schreiben sie lediglich zur bessern Uebersicht in dieser Form für jede Zeile heraus. In D_{2h}^q-Matrizen geben herausgeschriebene i_d sofort an, welche Symmetrieebenen $\frac{1}{4}$ vom Nullpunkt entfernt sind und welche auf diesen senkrecht stehenden Digyren als Schraubenachsen auftreten. Damit ist auch die Art der Untergruppe D_2^q bestimmt. So bedeutet in D_{2h}^6 $\mathfrak{a}$, $\mathfrak{b}$, $\mathfrak{c}$ linksstehendes l, ohne rechtsstehende i_s, dass $(001)_{\frac{1}{4}}$ eine Symmetrieebene und [001] eine Schraubenachse ist. Rechtsstehende i_s-Werte geben die Gleitkomponenten der Symmetrieebene bzw. die Entfernungen der darauf senkrecht stehenden Symmetrieachsen vom Nullpunkt an, z.B. h, l in D_{2h}^6 der β Zeile, dass (010) als Symmetrieebene die Gleitkomponente $\frac{1}{2}a+\frac{1}{2}c$ (x entspricht h und z entspricht l) und die [010]-Achse die Gleichung $\frac{1}{4}$, y, $\frac{1}{4}$ hat.

Die Vertikalkolonnen für x werden $= 1$, die für $y = 2$, die für $z = 3$ genannt, so dass auch Bezeichnungen wie i_1, i_2, i_3, $\sum_{1,3} i_\beta$ u.s.w. gebraucht werden können.

Die Indizes statt der x, y, z-Werte wurden im Hinblick auf die Formulierung des Strukturfaktors und der Auslöschungsgesetze gewählt. In den D_2^q-Matrizen kommt naturgemäss die Deutung irgend einer Zeile als Symmetrieebene nicht in Frage, in C_{2v}^q-Matrizen gilt die Deutung als Symmetrieachsen für zwei Zeilen und diejenige als Symmetrieebene für die dritte Zeile.

Entgegen einer der Form nach uneinheitlichen Formulierung des Strukturfaktors in den *Internationalen Tabellen* greifen wir auf einen früheren Vorschlag (Brandenberger & Niggli, 1928; Niggli, 1928) zurück. Da in D_{2h}^q stets ein Symmetriezentrum zum Nullpunkt gewählt wird, ist in diesen Raumsystemen der Strukturfaktor auf die generelle Form zu bringen:

$$A = \pm 8 \begin{Bmatrix}\cos\\ \sin\end{Bmatrix} 2\pi hx \begin{Bmatrix}\cos\\ \sin\end{Bmatrix} 2\pi ky \begin{Bmatrix}\cos\\ \sin\end{Bmatrix} 2\pi lz, \quad B = 0.$$

Variabel für die verschiedenen Raumsysteme und Aufstellungen ist nur, ob $\pm$ und jeweilen cos oder sin zu nehmen sind.

In D_2^q lauten in gleicher Variabilität die Strukturfaktoren stets

$$A = \pm 4 \begin{Bmatrix}\cos\\ \sin\end{Bmatrix} 2\pi hx \begin{Bmatrix}\cos\\ \sin\end{Bmatrix} 2\pi ky \begin{Bmatrix}\cos\\ \sin\end{Bmatrix} 2\pi lz,$$

$$B = \mp 4 \begin{Bmatrix}\sin\\ \cos\end{Bmatrix} 2\pi hx \begin{Bmatrix}\sin\\ \cos\end{Bmatrix} 2\pi ky \begin{Bmatrix}\sin\\ \cos\end{Bmatrix} 2\pi lz;$$

und für C_{2v}^q

$$A = \pm 4 \begin{Bmatrix}\cos\\ \sin\end{Bmatrix} 2\pi hx \begin{Bmatrix}\cos\\ \sin\end{Bmatrix} 2\pi ky \begin{Bmatrix}\cos\\ \sin\end{Bmatrix} 2\pi lz,$$

$$B = \pm 4 \begin{Bmatrix}\cos\\ \sin\end{Bmatrix} 2\pi hx \begin{Bmatrix}\cos\\ \sin\end{Bmatrix} 2\pi ky \begin{Bmatrix}\sin\\ \cos\end{Bmatrix} 2\pi lz.$$

Und nun gilt generell die sehr einfache Regel:* Es sind die sin- statt der cos-Werte bzw. die cos- statt der sin-Werte (allgemein die an tieferer Stelle stehenden Funktionen) zu wählen, wenn:

für $2\pi hx$ die Summe der auf Zeile α bezüglichen Zusatzindizes $i_{d\alpha}+i_{s\alpha} = i_\alpha$ (nun bezogen auf die Indizes hkl der zu betrachenden Fläche) ungerade ($= u$) ist,

für $2\pi ky$, wenn im gleichen Sinne die Summe $i_\beta = u$,

für $2\pi lz$, wenn im gleichen Sinne die Summe $i_\gamma = u$ ist.

Das untere statt des oberen Vorzeichen gilt, wenn die *einfache* Summe *aller* für die Matrix kennzeichnenden Zusatzindizes i als nun zu betrachtende Flächenindizes ungerade ist. (Jeder Zusatzindex tritt im ganzen aus den früher erwähnten Symmetriegründen zweimal auf, bei der einfachen Summenbildung wird jeder Zusatzindex stets nur einfach gezählt.)

Als Beispiel sei erwähnt: Strukturfaktor für D_{2h}^6 der Seite 264 erwähnten Aufstellung $\mathfrak{c}, \mathfrak{a}, \mathfrak{b} = Pncn$. Der Minuswert statt des Pluswertes tritt auf, wenn $h+k+l = u$ ist (da alle Indizes Zusatzindizes sein können); statt $\cos 2\pi hx$ ist $\sin 2\pi hx$ zu schreiben, wenn $h+k+l = u$ ist (da in Zeile α diese als i auftreten); statt $\cos 2\pi ky$ ist $\sin 2\pi ky$ zu schreiben, wenn $l = u$ ist (l ist einziger i-Wert für Zeile β); statt $\cos 2\pi lz$ ist $\sin 2\pi lz$ zu schreiben, wenn $h+k = u$ ist (h und k sind i-Werte von Zeile γ). Die Charakterentafel ist somit zugleich ein Abbild des Strukturfaktors für einen beliebigen Gitterkomplex. Ferner formuliert sie die zonalen und serialen, für x, y, z-Werte integralen, und die für hkl-Werte integralen oder zonalen Auslöschungsgesetze spezieller Punktlagen. Massgebend sind für *Zonen senkrecht zu Symmetrieebenen* einzig die zu den betreffenden Zeilen gehörigen (rechts stehenden) i_s. Es sind bei den D_{2h}^q-Gruppen in Zone $(hk0) = [001]$ nur die Interferenzen derjenigen Flächen vorhanden, für welche die Summe i_s der Zeile γ gerade ist, für Interferenzen $(h0l)$, d.h. Flächen der Zone [010], muss $\Sigma i_{s\beta}$ gerade sein, für Interferenzen $(0hl)$, d.h. Flächen der Zone [100], hingegen $\Sigma i_{s\alpha}$. Entspricht eine Zeile einer Symmetrieebene, so geben somit sofort die rechts stehenden i_s die *zonalen* Auslöschungsgesetze an.

Als Beispiel betrachten wir D_{2h}^6 mit der in den *Internationalen Tabellen* bevorzugten Aufstellung (in unserer Darstellung Seite 264 ist es die Aufstellung $\mathfrak{bca}$, die also nun als $\mathfrak{abc}$ gedacht wird). Sie lautet:

D_{2h}^6

	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	kl	
k	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	hl	D_2^2
	$\bar{1}$	1	1	h	

* Selbstverständlich könnte man (bei gleicher Nullpunktswahl) aus der Charakterentafel auch sofort den Strukturfaktor in der Form der *Internationalen Tabellen* aufschreiben.

und demgemäss gilt: vorhanden ist

$$\left.\begin{array}{l}(0kl) \text{ nur mit } k+l = \text{gerade} \\ (h0l) \text{ nur mit } h+l = \text{gerade}\end{array}\right\} \begin{array}{l}\text{gilt auch für } C_{2v}^{10} \\ \text{gleicher Matrix}\end{array}$$
$$(hk0) \text{ nur mit } h \quad = \text{gerade.}$$

Die *serialen*, nur bei Fehlen von zonalen Gesetzen besonders anzuführenden Auslöschungsgesetze, gebunden an Ebenen senkrecht zu Symmetrieachsen, sind durch die entsprechenden i_d-Werte gegeben.

(100) tritt nur in gerader Ordnung auf, wenn h ein i_d-Wert ist.

(010) tritt nur in gerader Ordnung auf, wenn k ein i_d-Wert ist.

(001) tritt nur in gerader Ordnung auf, wenn l ein i_d-Wert ist.

Die Auslöschungsgesetze für Gitterkomplexe bestimmter Punktlagen z.B. in Abhängigkeit von x bei beliebigen y, z, von y bei beliebigen x, z, von z bei beliebigen x, y lassen sich gleichfalls aus den Charakterentafeln ummittelbar ablesen. Da in den *Internationalen Tabellen* nur die Auslöschungsgesetze bei spezieller Punktsymmetrie angegeben werden, die Gesetze sich jedoch viel allgemeiner formulieren lassen, soll an dieser Stelle auf die sich aufdrängende Neuformulierung noch nicht eingegangen werden. Zusammenfassend genügt vorläufig die Angabe allgemeiner zonaler oder serialer Regeln bei beliebigen x, y, z, sowie der für (hkl) gültigen Regeln für beliebige Punkte auf Symmetrieebenen oder Symmetrieachsen (siehe Tabelle 1).

hergehenden kurz erläutert worden. Die jeweiligen 1 bis 6 verschiedenen Aufstellungen der D_{2h}^q-Raumsysteme stehen vertikal untereinander. Die auf [001] als Achse bezogenen C_{2v}^q-Systeme können in 4 oder 8 verschiedenen Stellungen auftreten. Die zu einem D_{2h}^q (verschiedener Aufstellung) gehörigen C_{2v}^q sind naturgemäss zugleich in jeder Aufstellung in verschiedener Achsenrichtung enthalten. Aequivalente C_{2v}^q parallel [001] sind durch Pfeile verbunden, so dass auch für sie sofort die Charakterentafeln verschiedener Nullpunktswahl überblickt werden können. Da die Gesamttafel zur besseren Reproduktion zweigeteilt wurde, finden sich auf Tafel 2 (b) Hinweise, sofern das gleiche C_{2v}^q einer anderen Nullpunktswahl zugleich noch auf Tafel 2 (a) auftritt. Sonst sind innerhalb einer Untertafel die verschiedenen Darstellungen an sich gleicher C_{2v}^q-Raumgruppen durch Pfeile miteinander verbunden.

Die 'Raumsystemsbestimmung' bei orthorhombischer Symmetrie und einfach primitiver Translationsgruppe wird nun zum einen einfachen Schematismus.

Nehmen wir z.B. an, Zone [010] lasse das Auslöschungsgesetz erkennen: Interferenzen nicht vorhanden wenn l = ungerade ist. Beruht dieses Auslöschungsgesetz auf der Raumsystemsymmetrie, so kommen in D_{2h} und C_{2v} nur die Raumsysteme in Frage, die in der β-Zeile rechtsstehend $i_s = l$ aufweisen.

Das sind nach Tabelle 2 folgende Systeme: D_{2h}^{11}, C_{2v}^2; D_{2h}^9, C_{2v}^2; D_{2h}^8, C_{2v}^5 oder C_{2v}^3; D_{2h}^4, C_{2v}^6; D_{2h}^{15}, C_{2v}^5; D_{2h}^{10}, C_{2v}^3; D_{2h}^{14}, C_{2v}^6; D_{2h}^5, C_{2v}^2; D_{2h}^{11}, C_{2v}^5; D_{2h}^7, C_{2v}^6; D_{2h}^{16}, C_{2v}^2; D_{2h}^6, C_{2v}^6.

Kommt hinzu: in Zone [100] Interferenz fehlend, wenn $k+l$ ungerade, so reduziert sich bereits die Auswahl auf:

D_{2h}^4, C_{2v}^6; D_{2h}^{14}, C_{2v}^6; D_{2h}^7, C_{2v}^6; D_{2h}^6, C_{2v}^6. Welches der vier D_{2h}^q bei holoedrischer Symmetrie in Frage kommt entscheidet das Auslöschungsgesetz in Zone [001], z.B. k ungerade oder h ungerade oder keinerlei zonale Auslöschungsregel.*

Tabelle 1. *Auswahlregeln*

Auswahlregeln für beliebiges x, y, z gültig.	Auswahlregeln für beliebiges h, k, l gültig.
In *Zonen* senkrecht zu Symmetrieebenen: Summe i_s der betreffenden Zeile muss gerade sein.	Für Punkte auf Symmetrieebenen: Summe i_s der betreffenden Zeile muss gerade sein. (Also bei Spiegelebenen keine Auswahl.)
Flächen *senkrecht* zu digonalen Achsen: Der von Null verschiedene Index muss gerade sein, wenn in der Achsenzeile i_d auftritt.	Für Punkte auf digonalen Achsen: Die einfache Summe der nicht zur Achsenzeile gehörigen i_s muss gerade sein, wobei ein allfälliger zu i_d gehöriger Index der Achsenzeile einzeln (d.h. für sich) gerade ist.
Bei spezieller Punktlage kommen zu den rechtsstehenden Bedingungen die zonalen oder serialen dieser linksstehenden Bedingungen hinzu.	Für Punkte, die zugleich Symmetriezentren sind: Es müssen einzeln gerade sein die Summen der zu i-Werten gehörigen Indizes der einzelnen Zeilen.

Somit ist tatsächlich die Charakterentafel auch die einfachste Formulierung der Auswahlregeln, bezogen auf die Symmetrieelemente.

Die Tabelle 2 (a, b) enthält als übersichtliche Bestimmungstabelle eine vollständige Beschreibung der Raumsysteme D_{2h}^q, C_{2v}^q, D_2^q in allen in Frage kommenden Aufstellungen. Die Mauguin–Hermann-Symbole sind nicht angegeben, weil sie ja in den möglichen Varianten *direkt* durch die Charakterentabelle dargestellt werden. Jede Charakterentafel ist zugleich ein vollständiges Symbol dieser Art. Wie man einzeln die Symmetrieelemente, Punktsymmetriegruppen, Untergruppen, Strukturfaktoren, Auswahlregeln abliest, ist im Vor-

Als Normalaufstellung eines Raumsystems C_{2v}^q bezeichnen wir die Aufstellung mit $[001]_{00}$ als Achse, sie

* Die weiteren möglichen, d.h. in Frage kommenden Raumsysteme ergeben sich ohne weiteres, wenn auch Charakterensysteme aufgesucht werden, die keine neuen, jedoch weniger i_s Werte (inc. Null) in den einzelnen Zeilen aufweisen.

Table 2(*a*)

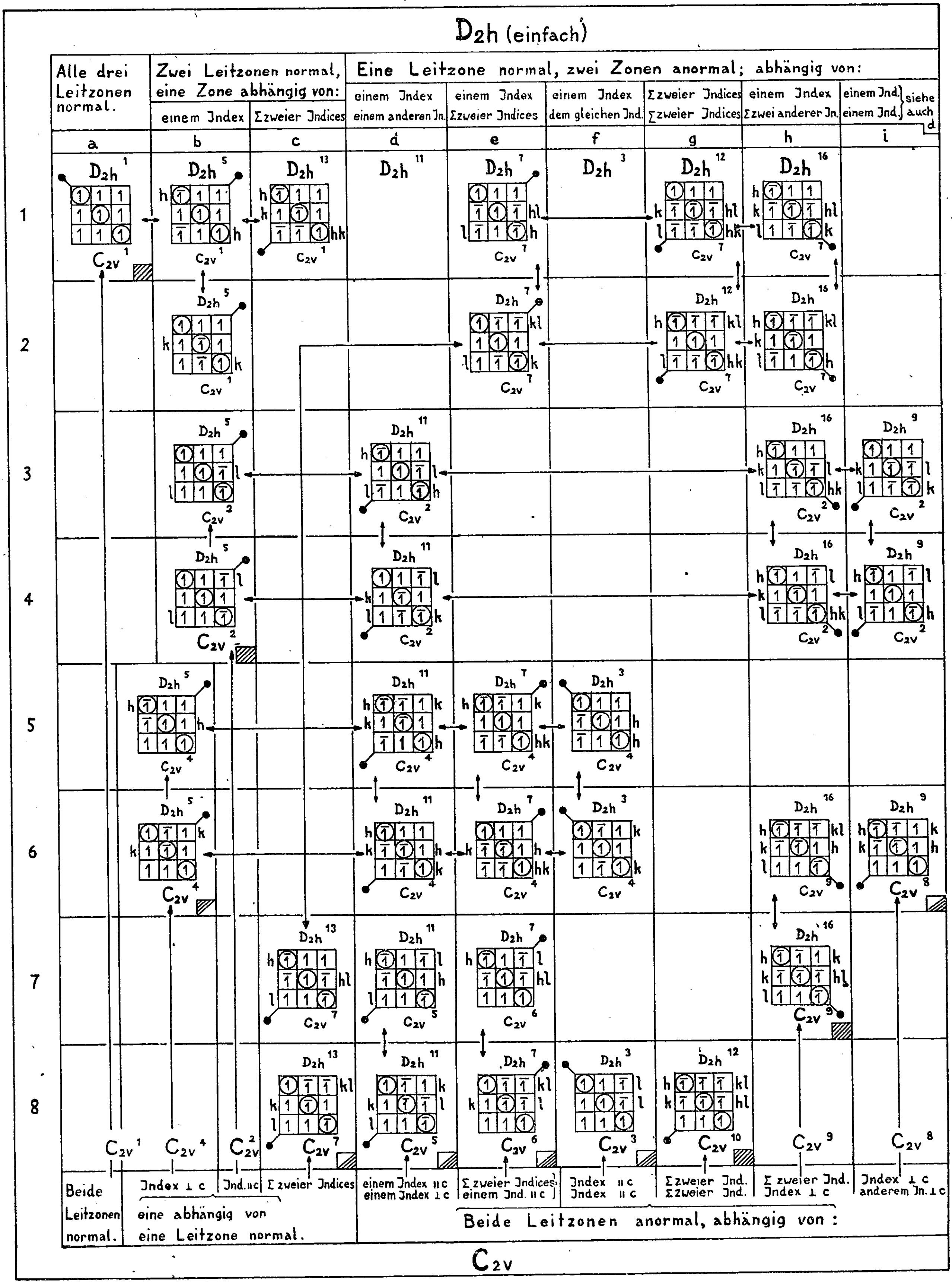
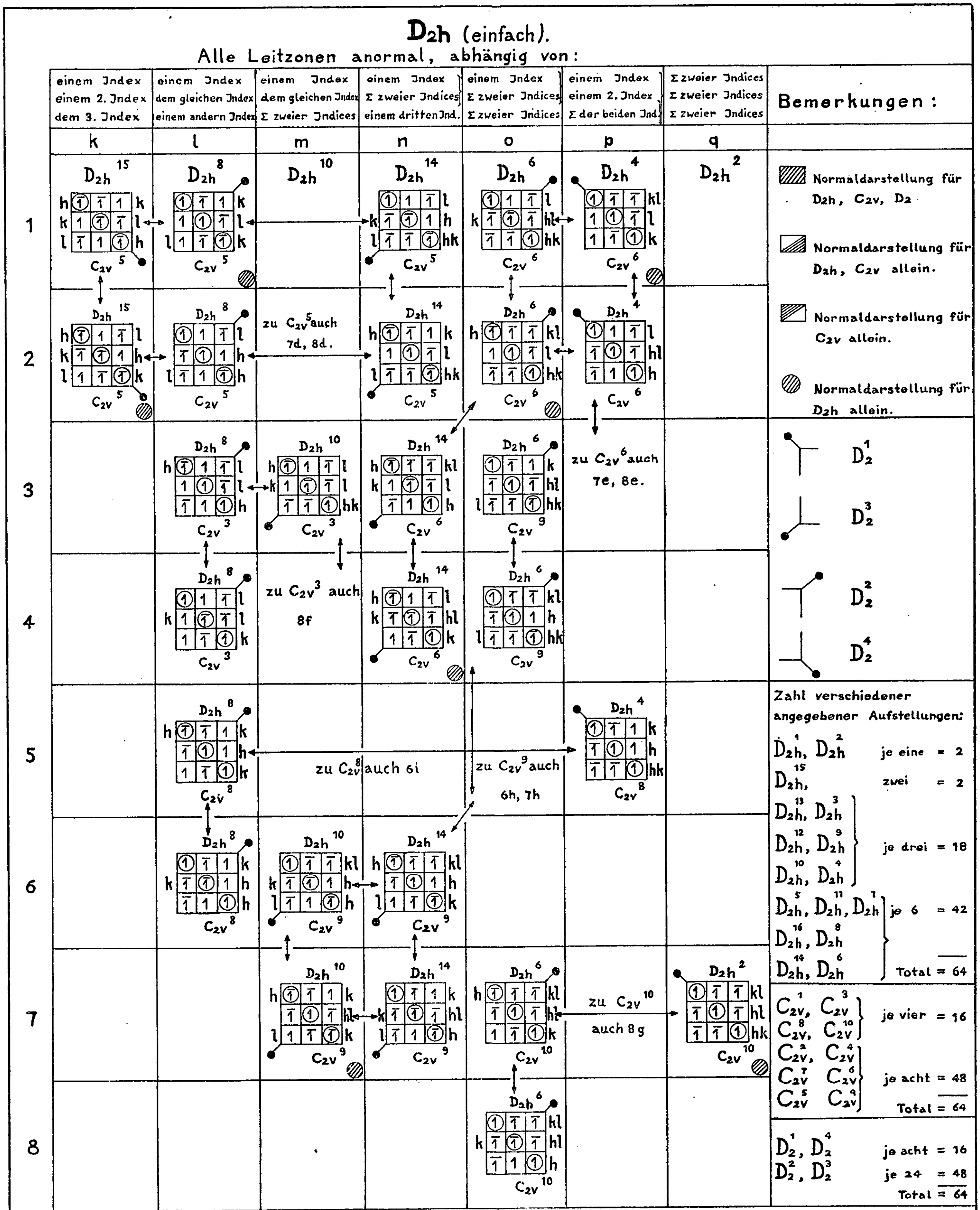
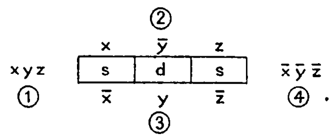

D2h (einfach)
Alle drei Leitzonen normal.
Zwei Leitzonen normal, eine Zone abhängig von:
einem Index
Σ zweier Indices
Eine Leitzone normal, zwei Zonen anormal; abhängig von:
einem Index einem anderen Jn.
einem Index Σ zweier Indices
einem Index dem gleichen Jnd.
Σ zweier Indices Σ zweier Indices
einem Index Σ zwei anderer Jn.
einem Jnd. einem Jnd. siehe auch d
a
b
c
d
e
f
g
h
i
1
2
3
4
5
6
7
8
Beide Leitzonen normal.
Index ⊥ c
Jnd. ∥ c
Σ zweier Indices
eine abhängig von eine Leitzone normal.
einem Index ∥ c einem Index ⊥ c
Σ zweier Indices einem Jnd. ∥ c
Index ∥ c Index ∥ c
Σ zweier Jnd. Σ zweier Jnd.
Σ zweier Jnd. Index ⊥ c
Index ⊥ c anderem Jn. ⊥ c
Beide Leitzonen anormal, abhängig von:
C2v

Table 2(*b*)

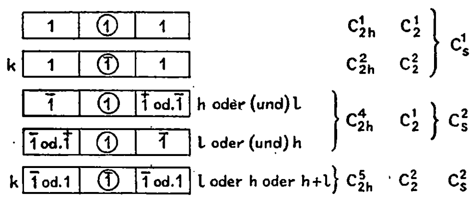


C_{2v} in Nichtnormaldarstellung. Normaldarstellung siehe 2(*a*) ist in der Bestimmungstabelle (von unten her) benutzt und soll immer zugleich die Normalaufstellung für das zugeordnete D_{2h} sein. D^q_{2h}-Systeme, die keine Zeile mit zwei positiven s-Werten enthalten, haben eine andere Normalaufstellung, die jeweilen mit schraffiertem Kreis bezeichnet ist. Alle Normalaufstellungen sind im übrigen in der letzten Kolonne von Tabelle 2 (b) erläutert.

Selbstverständlich enthält die Tabelle auch alle Raumsysteme einfacher Translationsgruppen vom Typus C_1, C_i, C^q_2, C^q_s, C^q_{2h}. Doch kann man sich in diesem Falle in der Darstellung auf eine Zeile beschränken,



wobei gelten: für C_1-Raumsysteme nur Koordinaten vom Typus ①, für C^q_s vom Typus ①+②, für C_2 vom Typus ①+③, für C^q_{2h} vom Typus ①②③④ und für C_i vom Typus ①+④. Man leitet sofort für monokline Raumsysteme die Möglichkeiten ab:



Das Ablesen der Symmetrieelemente, Punktlagen, Strukturfaktoren, Auslöschungen gehorcht den bereits erwähnten Regeln. Somit enthalten die Tabellen 2 (a und b) nicht nur die Beschreibungen aller nichtwirteligen und nichtkubischen Raumsysteme einfacher Translationsgruppe, es sind auch die entsprechenden Tabellen (Niggli & Brandenberger, 1935, p. 378) zur Raumgruppenbestimmung mit ihren Vieldeutigkeiten in ihnen verarbeitet. Das Auffinden des neuen Begriffes 'Raumsystemcharaktere' gestattet also die gruppentheoretischen Tabellen wesentlich zu vereinfachen und zu ergänzen.

In einer zweiten Mitteilung soll zur weiteren Einführung in dieses neue kondensierte Tabellenwerk (verbunden mit rein kombinatorisch-mathematischer Ableitung aller Raumsysteme) wenigstens beispielhaft erläutert werden, wie sich die Charakterentafeln bei nicht einfacher Translationsgruppe sowie in tetragonalen, trigonalen, hexagonalen bzw. kubischen Systemen gestalten. Man wird dann erkennen, dass auch in diesen Fällen die Matrizendarstellung an Einfachheit nichts einbüsst und dass die Raumsystemcharaktere für kristallphysikalische Fragen ebenso grundlegend sind wie die Charaktere der Schwingungssysteme in der Molekülspektroskopie. In der Molekülspektroskopie (Schwingungssysteme) sind die charakteristischen Grössen auch im gruppentheoretischen Sinne 'Charaktere'. Bei der Übertragung des Begriffes auf die Raumsysteme wurde auf diese Zusammenhänge noch keine Rücksicht genommen. Die Analogie betrifft den geometrischen Aspekt und die Anwendbarkeit.

Schrifttum

BRANDENBERGER, E. & NIGGLI, P. (1928). *Z. Krystallogr.* **68**, 301.

NIGGLI, P. (1928). *Handbuch der Experimentalphysik*, **7**, 1.

NIGGLI, P. (1946). *Helv. chim. Acta*, **29**, 991.

NIGGLI, P. (1947). *Helv. chim. Acta*, **30**, 1562.

NIGGLI, P. (1949*a*). *Helv. chim. Acta*, **32**, 770.

NIGGLI, P. (1949*b*). *Helv. chim. Acta*, **32**, 913.

NIGGLI, P. (1949*c*). *Helv. chim. Acta*, **32**, 1453.

NIGGLI, P. & BRANDENBERGER, E. (1935). Kapitel IV in *Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen*. Berlin: Borntraeger.