116. Die geometrischen Grundlagen der Auswahlregeln der Eigenschwingungen und Termaufspaltungen in Molekel- und Krystallverbindungen

2. Mitteilung[1])

von **Paul Niggli.**

(28. XII. 48.)

2. Die Kombination von Symmetrieelementen und die Ableitung der verschiedenen Klassen eines Schwingungssystems. Das direkte Produkt von C_m mit C_i ist C_{mi}, das, sofern m gerade ist, mit C_{mh} identisch wird. Aus den Symmetrieoperationen von C_m bilden sich neu: aus $f_1 = i_2$; aus $f_n = s_n$ oder, wenn n ungerade ist, s_n'; aus $f_2 = s_2$. Als Charaktere erhalten die neuen Operationen alle die gleichen Werte wie die Ausgangsoperationen (g-Reihe) oder alle die entsprechenden Werte mit umgekehrten Vorzeichen (u-Reihe). Es gibt somit jetzt zwei A (A_g und A_u), zwei B (B_g und B_u) und je zwei E_n (E_{ng} und E_{nu}). Die entarteten Doppelschwingungen bleiben trennbar und es gelten, bezogen auf die neue Ordnungszahl 2 m, die gleichen Matrizengesetzmässigkeiten wie vorher (für m-zählige Achsen allein ist die Ordnungszahl = m). Ein Beispiel ist die Charakterentafel für C_{6h} (Tabelle 3)[2]).

Tabelle 3.

Charaktere von C_{6h}.

	f_1	$2\,f_6$	$2\,f_3$	f_2	Inversion i_2	Inversionshexagyroide (C_{3h}), $2\,s_6$	Inversionstrigyroide (C_{3i}), $2\,s_6'$	SE⊥ Achse s_2	Zeile
A_g . . .	1	1	1	1	1	1	1	1	I
A_u . . .	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	II
B_g . . .	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	III
B_u . . .	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	IV
E_{1g} . . .	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	V
E_{1u} . . .	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$	$\bar{1}$	1	2	VI
E_{2g} . . .	2	$\bar{1}$	$\bar{1}$	2	2	$\bar{1}$	$\bar{1}$	2	VII
E_{2u} . . .	2	$\bar{1}$	$\bar{1}$	2	$\bar{2}$	1	1	$\bar{2}$	VIII
Kolonne .	a	b	e	c	α	β	ε	γ	

[1]) 1. Mitt. Helv. **32**, 770 (1949).

[2]) Tabellen 1 und 2, s. 1. Mitteilung, loc. cit.

Daraus geht übrigens hervor, was leicht allgemein beweisbar ist, dass sich zueinander entartete Schwingungen stets entweder beide symmetrisch $(+2)$ oder beide antisymmetrisch (-2) gegenüber einem Symmetriezentrum oder einer zur Achse senkrechten Symmetrieebene verhalten müssen. C_{3h} $(= S_6)$ und C_{3i} $(= S_6')$ sind Untergruppen von C_{6h}. Der Zusammenhang zwischen allen diesen Formulierungen ergibt sich daraus, dass zu C_{3h} die Kolonnen a, e, β, γ gehören, für welche die Zeilen I und IV zu A, II und III zu B, V und VIII zu E′ und VI und VII zu E″ zusammenfallen. Zu C_{3i} gehören die Kolonnen a, e, α, ε mit Zusammenfallen der Zeilen I und III, II und IV, V und VII und VI und VIII.

Symmetriegruppen von der Ordnung 2 m entstehen auch durch Kombination von C_m mit einer zur Gyre parallelen Spiegelebene (C_{mv}) oder mit einer dazu senkrechten Digyre (D_m). Es entstehen neu m gleichwertige Spiegelebenen oder m Digyren, sofern m ungerade ist, und m/2 unter sich gleichwertige und m/2 andere unter sich gleichwertige Spiegelebenen bzw. Digyren, wenn m gerade ist. Sind die Hauptachsen Rotationsachsen der Zusatzkomponente 180^0, also mit gleichviel $\overset{+}{1}$ und $\bar{1}$ als Charaktere, so erhalten die zwei gleichwertigen Gruppen von Digyren und Spiegelebenen Charaktere von verschiedenen Vorzeichen (eine 1 und die andere $\bar{1}$). Leicht beweisbar und auch der Anschauung entnehmbar ist, dass von den jeweilen zueinander entarteten Schwingungen sich eine symmetrisch, die andere antisymmetrisch zu einer dieser Spiegelebenen oder Digyren verhält. Die diesbezüglichen Charaktere der Digyren oder Spiegelebenen sind daher $1 + \bar{1} = 0 =$ Null und die Doppelschwingungen sind nicht mehr trennbar, so dass die Quadrate der Charaktere ganz in Rechnung gestellt werden müssen. Ist die Ausgangsgruppe eine Gruppe S_m (m-zählige Drehinversionsachse), so entstehen m/2 Digyren und m/2 hauptachsenparallele Spiegelebenen (Tabelle 4). D_m, C_{mv}, S_{mv}, S'_{mv} sind der Charakterendarstellung nach einander äquivalent.

Tabelle 4.

Charaktere für D_6, C_{6v}, D_{3d}, D_{3h}.

D_6	f_1	$2\,f_6$	$2\,f_3$	f_2	$3\,f_2$	$3\,f_2$	Summe der Quadrate
C_{6v}	f_1	$2\,f_6$	$2\,f_3$	f_2	$3\,s_2$	$3\,s_2$	
D_{3d}	f_1	$2\,s_6'$	$2\,f_3$	i_2	$3\,f_2$	$3\,s_2$	
D_{3h}	f_1	$2\,s_6$	$2\,f_3$	s_2	$3\,f_2$	$3\,s_2$	
A_1 od. A' od. A_{1g} .	1	1	1	1	1	1	12
A_2 od. A'' od. A_{1u} .	1	1	1	1	1	$\bar{1}$	12
B_1 od. B' od. A_{2g} .	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	12
B_2 od. B'' od. A_{2u} .	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	12
E_1 od. E_1' . . .	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	0	0	12
E_2 od. E_1'' . . .	2	1	$\bar{1}$	2	0	0	12
Summe d. Quadrate	12	12	12	12	12	12	

Es wäre weitaus am zweckmässigsten, alle aus S_m entstehenden Gruppen S_{mv} zu nennen. In der Krystallographie werden sie, wenn m durch vier teilbar ist, $D_{(m/2)d}$ genannt, die Spiegelebenen halbieren die Winkel zweier Digyren. Ist m = 2 p, so ist S_{2p} als Drehungsachse ungeradzählig, neben den hauptachsenparallelen Spiegelebenen entsteht eine senkrecht dazu stehende und die Digyren sind die Schnittlinien beider Sorten von Spiegelebenen. Die krystallographische Bezeichnung ist dann D_{ph}. Aus S'_{2p} bzw. S'_{p1} entstehen Typen mit den hauptachsenparallelen Spiegelebenen senkrecht zu den Digyren; sie werden meist D_{pd} genannt.

Aus einem A oder einem B enststehen in allen Fällen zwei Typen, die E werden lediglich untrennbar mit 0, 0 als neuen Charakteren für Digyren und Spiegelebenen.

Aus den so gewonnenen Gruppen (z. B. am einfachsten aus D_m) erhält man durch Hinzufügen der Inversion (soweit nicht bereits enthalten wie in D_{pd}) als direktes Produkt die neuen Symmetrieklassen D_{mh} (z. B. aus C_{6v}, D_6 und D_{3h} neu die Symmetrieklasse D_{6h}). Dabei gilt für die neue Charakterendarstellung das Gleiche wie für C_m + Inversion. Die Gesamtordnungszahl wird N = 4 m und die 2 m neuen Operationen ergeben sich wie dort angegeben mit dem Zusatz: $(m/2)\, f_2$ + Inversion erzeugt $(m/2)\, s_2$; $(m/2)\, s_2$ + Inversion erzeugt $(m/2)\, f_2$.

Die Charaktere für die neuen Symmetrieoperationen entsprechen somit denjenigen der Ausgangsoperationen entweder mit gleichen oder umgekehrten Vorzeichen, so dass sich jeder Schwingungstypus in zwei neue aufspaltet, die zweckmässig durch zusätzliche Indices voneinander unterschieden werden.

So erhält man beispielsweise für D_{6h} aus D_6 die Tabelle 5.

Tabelle 5.

Charaktere von D_{6h}.

	f_1	$2\,f_6$	$2\,f_3$	f_2	$3\,f_2$	$3\,f_2$	i_2	$2\,s_6$	$2\,s_6'$	s_2	$3\,s_2$	$3\,s_2$	Zeile
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	I
A_{1u}	1	1	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	II
A_{2g}	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	III
A_{2u}	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	1	IV
B_{1g}	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	V
B_{1u}	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	VI
B_{2g}	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	VII
B_{2u}	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	1	$\bar{1}$	VIII
E_{1g}	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	0	0	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	0	0	IX
E_{1u}	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	0	0	$\bar{2}$	$\bar{1}$	1	2	0	0	X
E_{2g}	2	$\bar{1}$	$\bar{1}$	2	0	0	2	$\bar{1}$	$\bar{1}$	2	0	0	XI
E_{2u}	2	1	$\bar{1}$	2	0	0	$\bar{2}$	1	1	$\bar{2}$	0	0	XII
	a	b	e	c	g_1	g_2	α	β	ε	γ	σ_1	σ_2	

Man erhält rückwärts die Tabellen für:

D_6 aus Kolonne a b e c g_1 g_2 unter Zusammenfall I = II, III = IV, V = VI, VII = VIII, IX = X, XI = XII

D_{3h} aus Kolonne a e g_1 β γ σ_2 unter Zusammenfall I = VI, II = V, III = VIII, IV = VII, IX = XII, X = XI

C_{6v} aus Kolonne a b e c σ_1 σ_2 unter Zusammenfall I = IV, II = III, V = VIII, VI = VII, IX = X, XI = XII

C_{6h} aus Kolonne a b e c α β ε γ unter Zusammenfall I = III, II = IV, V = VII, VI = VIII

C_{3h} aus Kolonne a e ε γ unter Zusammenfall I = III, II = IV, V = VII, VI = VIII, IX = XII, X = XI

C_6 aus Kolonne a b e c unter Zusammenfall I bis IV, V bis VIII, IX = X, XI = XII.

ausserdem sind auch D_{3d}, C_{3i}, D_3, C_{3v}, C_3 daraus ableitbar.

Die an einem Beispiel erläuterten Zusammenhänge gelten für die gesamte Punktsymmetrielehre, so dass es (abgesehen von kubischen und ikosaedrischen Punktgruppen) gelingt, in einer einzigen Tabelle alle Charakterendarstellungen zusammenzufassen. Wir gehen von D_{mh} aus mit m im allgemeinsten Fall $= p \cdot 2^z$. Es ist p irgendeine positive ungerade Zahl, z irgendeine beliebige positive Zahl. $z = 0$ ergibt D_{ph}, $z = 1$ ergibt D_{2ph}, $z \geqq 2$ ein durch vier teilbares m. Mit $p = 1$ ergibt sich die Punktgruppe $D_{2^z h}$. Die Drehungen um die $m = p\,2^z$-zählige Achse zerlegen wir in:

a	b	c	d	e
Identität Drehung um 2π oder 0^0 bzw. 360^0	Drehungen um $u\frac{2\pi}{p \cdot 2^z} = u\frac{\pi}{p \cdot 2^{z-1}}$	$\pi = 180^0$, sofern z nicht 0	Drehungen um $u\frac{\pi}{p \cdot 2^{z-2}}$ $u\frac{\pi}{p \cdot 2^{z-3}}$; allg. $u\frac{\pi}{p \cdot 2^x}$ bis $x = 0$	$n\frac{2\pi}{p}$

Dabei umfasst u alle ungeraden positiven Zahlen bis zu einem angebbaren Grenzwert: für b bis $p \cdot 2^{z-1} - 1$, für d jeweilen bis $p \cdot 2^x - 1$, für e geht n (gerade und ungerade) bis $(p-1)/2$. Ist $z = 0$, so fehlen b, c, d; ist $z = 1$, so fehlt d; ist $p = 1$, so fehlt e.

Betrachten wir als Beispiel die Drehung um eine $15 \cdot 2^4$-zählige, d. h. 240-zählige Achse: Es enthält b die Drehungen $u\,2\pi/240$ mit u ungerade, d. h. $u\pi/120 = u\pi/15 \cdot 2^3$. Da $p = 15$ die ungeraden Faktoren 3 und 5 enthält, sind darin enthalten Drehungen um die 80-, 48- und 16-zähligen Unterachsen, nämlich $u\pi/40$, $u\pi/24$, $u\pi/8$. Da u auf $u\pi/120$ bezogen alle ungeraden Zahlen von 1 bis $15 \cdot 2^3 - 1 = 119$ umfasst, zerfällt b nach u in $p \cdot 2^3/2 = 60$ Einzelkolonnen.

In d sind enthalten die Drehungen vom Typus d_2, d_4, d_8.

$$d_2 = \frac{u\pi}{15 \cdot 2^2} = \frac{u\pi}{60}; \quad d_4 = \frac{u\pi}{15 \cdot 2^1} = \frac{u\pi}{30}; \quad d_8 = \frac{u\pi}{15 \cdot 2^0} = \frac{u\pi}{15}.$$

Für d_2 (Drehungen einer 120-zähligen Achse) ist $u = 1, 3, 5 \ldots$ bis 59, entsprechend 30 Kolonnen. Da 15 die Faktoren 3, 5, 15 besitzt, sind darin auch die Drehungen $u\,\pi/20$, $u\,\pi/12$, $u\,\pi/4$ der 40-, 24-, 8-zähligen Unterachsen enthalten.

Für d_4 (Drehungen einer 60-zähligen Achse) ist $u = 1, 3, 5 \ldots$ bis 29, entsprechend 15 Kolonnen. Enthalten sind in d_4 die Drehungen $u\,\pi/10$, $u\,\pi/6$, $u\,\pi/2$ der 20-, 12- und 4-zähligen Unterachsen.

Für d_8 (Drehungen um eine 30-zählige Achse) ist $u = 1, 3, 5 \ldots$ bis 13. Das führt für d_8 zu 7 Kolonnen ($15\,\pi/15$ ergibt die herausgenommene Drehung von π der Kolonne c). Enthalten sind in d_8 Drehungen um $u\,\pi/5$, $u\,\pi/3$ der 10- und 6-zähligen Achsen.

Somit ist die Gesamtzahl der Subkolonnen von d gegeben durch $30+15+7 = 52 = [p\,(2^z - 2) - 2]/4 = [15 \cdot 14 - 2]/4$.

e enthält alle Drehungsarten einer 15-zähligen Achse $n\,2\,\pi/15$ mit $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$, also mit $[p-1]/2 = 7$ Kolonnen; eingeschlossen sind die Drehungen der 3- und 5-zähligen Unterachsen. Den 60 Einzelkolonnen von b stehen somit $52+7 = 59$ Einzelkolonnen d und e gegenüber. Zusammen mit den Kolonnen $a = 1\,f_1$ und $c = 1\,f_2$ ergibt dies $2 \cdot 60 + 2 \cdot 59 + 2 = 240$ Symmetrieoperationen, entsprechend der Ordnung einer 240-zähligen Achse.

Allgemein ist die Zahl der senkrecht zur Hauptachse stehenden Digyren in $D_{p\,2^z}$ zweimal $p \cdot 2^z/2$, so dass $D_{p\,2^z}$ die Ordnung 2n enthält, wenn $C_{p\,2^z}$ die Ordnung n hat. Aus $D_{p\,2^z}$ entsteht als direktes Produkt mit der Inversion $D_{(p\,2^z)\,h}$.

Acht Zeilen, nämlich die der A- und B-Typen, enthalten unabhängig von z (bei $z = 1$ ändern sich in B für die Kolonnen c und γ die Vorzeichen) die gleichen Zahlen 1 und $\bar{1}$. Für irgendein $D_{(p\,2^z)\,h}$ mit $z \geqq 2$ ist die Gesamtkolonnen- (und somit auch Zeilen-)zahl der quadratischen Matrix gegeben durch $p \cdot 2^z + 6$ (genetisch besser geschrieben $p \cdot 2^z + 4 + 4/2$); somit fallen auf die E-Zeilen (entartete Schwingungen) $p \cdot 2^z + 6 - 8 = p \cdot 2^z - 2$ Zeilen. Diese enthalten von $m = p \cdot 2^z$ abhängige Größen. Anderseits gibt es in $D_{(p\,2^z)\,h}$ (mit $p > 1$, $z \geqq 2$) auch 8 Kolonnen, deren Charaktere unabhängig von der Achsenzähligkeit sind, während $(p \cdot 2^z - 2)$ Kolonnen cos-Grössen enthalten, die jeweilen von der Achsenzähligkeit abhängen.

Zur Vereinfachung der Tabellen nennen wir Winkel $2\,\pi/p\,2^z$ = Winkel φ und Winkel $2\,\pi/p = \psi$. Es ist $\psi = \varphi \cdot 2^z$. Die in den d-Kolonnen auftretenden Winkel sind Winkel $\varphi \cdot q$ mit $q = 2^1$ bis 2^{z-1}.

So lässt sich mühelos die Haupttabelle I (Ia und Ib) konstruieren, die für alle wirteligen Symmetrien, die nur eine Hauptachse besitzen, die Charakterendarstellungen enthält, wobei im Einzelfall nur die speziellen cos-Werte einzusetzen sind. Die Geltung des Gesetzes über die Summe der Charakterenquadrate der Zeilen und Kolonnen ist leicht einzusehen, da nach einem einfach beweisbaren, doch in dieser Form selten benutzten Satz die Summe der $\cos^2$ aller zu einer m-zähligen Symmetrieachse gehörigen Drehwinkel (inkl. 360^0) = m ist. Auch der Übergang zur unendlichzähligen Hauptachse bietet keinerlei Schwierigkeiten.

Die Haupttabelle I enthält zunächst die vollständige Charakterendarstellung für irgendein $D(p\,2^z)h$. Daraus aber lassen sich sofort die Tabellen für alle Untergruppen wie $D(p\,2^z)$, $C(p\,2^z)v$ usw. aufstellen. Damit in der Kopfkolonne keine Veränderungen der Faktoren notwendig sind, beschränkt man sich am besten für ein gegebenes $D_{(p\,2^z)\,h}$ auf die sechs unmittelbaren Untergruppen, die als Hemiedrien und Tetartoedrien bekannt sind (Zusammenfassung von Symmetrie-

Haupttabelle I.

Charakterentafel für $D_{(p2^z)h} = D_{(p2^z)i} = D_{mh}$ und alle digonalen und wirteligen Krystallsymmetrien.

Ia (symmetrische und antisymmetrische Schwingungen)

	a	b	c	$d_2, d_4 \ldots d_\varphi \ldots d_{2p}$	e	g_1	g_2	α	β	γ	δ_φ	ε	σ_1	σ_2	Gewöhnliche Restsymmetrien
		nur wenn Drehung	für reine $Z \geqq 1$	nur wenn $Z \geqq 2$	reell nur wenn $p \geqq 3$				nur wenn $Z \geqq 1$		nur wenn $Z \geqq 2$	reell nur wenn $p \geqq 3$			
	$1 f_1$	$2 f_m{}^u$	$1 f_2$	$2 f_{(\frac{m}{\varphi})}{}^u$	$2 f_p{}^n$	$p2^{z-1} \cdot f_2$	$p2^{z-1} \cdot f_2$	$1 i_2$	$2 \mathfrak{s}_m{}^u$	$1 \mathfrak{s}_2$	$2 \mathfrak{s}(\frac{m}{\varphi})^u$	$2 \mathfrak{s}'_{2p}$	$p2^{z-1} \cdot \mathfrak{s}_2$	$p2^{z-1} \cdot \mathfrak{s}_2$	
	Identität	$2 \cos u \frac{\pi}{p2^{z-1}}$ $2 \cos u\varphi$ $u \leqq p \cdot 2^{z-1} - 1$, jedoch stets ungerade	$1 \cos \pi$	$2 \cos u \frac{\pi}{p \cdot 2^z}$ $= 2 \cos q u \varphi$ $x = z-2$ bis 0 $u \leqq p \cdot 2^x - 1$ jedoch stets ungerade	$2 \cos n \frac{2\pi}{p}$ $2 \cos n \psi =$ $2 \cos n \varphi 2^z$ $n \leqq \frac{p-1}{2}$	zu vereinigen zu $p \cdot f_2$, wenn $z = 0$		$I_n =$ Inversion	Normal = Gyroide S_m wenn $z > 1$; wenn $z = 1$ ergibt sich $C_{ph} = S_{2p}$	SE senkrecht zu Hauptachse	Normal = Gyroide $S_{(\frac{m}{\varphi})}$; wenn $\frac{m}{\varphi} = 2p$ wird $S_{2p} = C_{ph}$	$S'_{2p} = C_{pi}$	zu vereinigen als $p \cdot \mathfrak{s}_2$, wenn $z = 0$		
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$D_{p2^z i}$
A_{1u}	1	1	1	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	D_{p2^z}
A_{2g}	1	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$C_{p2^z i}$
A_{2u}	1	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	1	$C_{p2^z v}$
B_{1g}	1	$\bar{1}$	$Z=1$: $\bar{1}$; $Z \geqq 2$: 1	1	1	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	$Z=1$: $\bar{1}$; $Z \geqq 2$: 1	1	1	1	$\bar{1}$	$D'_{p2^{z-1} i}$
B_{1u}	1	$\bar{1}$	$Z=1$: $\bar{1}$; $Z \geqq 2$: 1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	$Z=1$: 1; $Z \geqq 2$: $\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	$S_{p2^z v'}$
B_{2g}	1	$\bar{1}$	$Z=1$: $\bar{1}$; $Z \geqq 2$: 1	1	1	$\bar{1}$	1	1	$\bar{1}$	$Z=1$: $\bar{1}$; $Z \geqq 2$: 1	1	1	$\bar{1}$	1	$D''_{p2^{z-1} i}$
B_{2u}	1	$\bar{1}$	$Z=1$: $\bar{1}$; $Z \geqq 2$: 1	1	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$Z=1$: 1; $Z \geqq 2$: $\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	$S_{p2^z v''}$

gruppen zu Symmetriesystemen). Haupttabelle II gibt an, welche Kolonnen jeweilen wegfallen, welche übrig bleiben. Dabei sind zur leichteren Übersicht die Gruppen mit nur 2p- und mit nur p-zähliger Achse (Fehlen der Kolonne d, bzw. b, d, c) besonders aufgeführt. Der Wegfall von Kolonnen hat den Zusammenfall von Zeilen zur Folge. Welcher Art dieser Zusammenfall ist, geht aus Haupttabelle III

Haupttabelle I.

Charakterentafel für $D_{(p2^z)h} = D_{(p2^z)i} = D_{mh}$ und alle digonalen und wirteligen Krystallsymmetrien.

Ib (entartete Schwingungen)

	a	b	c	d_q	e	g_1	g_2	α	β	γ	δ_q	ε	σ_1	σ_2	Minimale Restsymm.
E_{1g}	2	$2\cos u\varphi$	$\bar{2}$	$2\cos qu\varphi$	$2\cos n\psi$	0	0	2	$2\cos u\varphi$	$\bar{2}$	$2\cos qu\varphi$	$2\cos n\psi$	0	0	C_i
E_{1u}	2	$2\cos u\varphi$	$\bar{2}$	$2\cos qu\varphi$	$2\cos n\psi$	0	0	$\bar{2}$	$-2\cos u\varphi$	2	$-2\cos qu\varphi$	$-2\cos n\psi$	0	0	C_s
E_{2g}	2	$2\cos 2u\varphi$	2	$2\cos 2qu\varphi$	$2\cos 2n\psi$	0	0	2	$2\cos 2u\varphi$	2	$2\cos 2qu\varphi$	$2\cos 2n\psi$	0	0	C_{2h}
E_{2u}	2	$2\cos 2u\varphi$	2	$2\cos 2qu\varphi$	$2\cos 2n\psi$	0	0	$\bar{2}$	$-2\cos 2u\varphi$	$\bar{2}$	$-2\cos 2qu\varphi$	$-2\cos 2n\psi$	0	0	C_2
bis $y-1$ mit $y = p2^{z-1}$ ($z=0$, $y-1=\frac{p-1}{2}$)	– – – – – – –	– – – – – – –	– – + + – – –	– – – – – – –	– – – – – – –	– – – – – – –	– – – – – – –	+ – + – – – –	+ – + – – – –	– + + – – – –	+ – + – – – –	+ – + – – – –	– – – – – – –	– – – – – – –	
$E_{(y-1)g}$	2	$2\cos(y-1)u\varphi$	2 | $\bar{2}$	$2\cos(y-1)qu\varphi$	$2\cos(y-1)n\psi$	0	0	2	$2\cos(y-1)u\varphi$	2 | $\bar{2}$	$2\cos(y-1)qu\varphi$	$2\cos(y-1)n\psi$	0	0	C_i
$E_{(y-1)u}$	2	$2\cos(y-1)u\varphi$	2 | $\bar{2}$	$2\cos(y-1)qu\varphi$	$2\cos(y-1)n\psi$	0	0	$\bar{2}$	$-2\cos(y-1)u\varphi$	$\bar{2}$ | 2	$-2\cos(y-1)qu\varphi$	$-2\cos(y-1)n\psi$	0	0	C_s

z eine positive ganze Zahl einschliesslich 0
x ebenso, von z-2 bis 0
y ebenso bis $y-1 = p \cdot 2^{z-1} - 1$
n $=1, 2, 3, 4 \ldots$ irgend eine positive Zahl bis $\frac{p-1}{2}$
u ungerade positive Zahl bis zum jeweiligen Maximalwert
p ungerade positive Zahl; ist $p=1$, so ist die Achse 2^z-zählig
q $=2^1, 2^2, 2^3 \ldots$ bis höchstens 2^{z-1}

f_m^x bedeutet aus dem Drehungszyklus m^{ter} Ordnung die Drehung um den Winkel $x \cdot \frac{2\pi}{m} = x \frac{\pi}{\frac{m}{2}}$
So ist $2f_5^1$ eine Drehung um $\pm 72°$ und
$2f_5^2$ eine Drehung um $\pm 144°$

B-Typen fehlen, wenn $z=0$
E-Typen fehlen, wenn $z=1$, $p=1$

hervor. Sie enthält auch für die A-, B- und E-Typen die aus diesen Zusammenhängen resultierende zweckmässigste Bezeichnung, die leider nicht immer mit der in der Literatur vermerkten übereinstimmt.

In D_{mh}, D_m und C_{mv} sind die entarteten Schwingungen nicht trennbar, in den Untergruppen C_{mh}, C_{ph}, C_m, S_m' und S_m jedoch trennbar (unterstrichene E). Im letzteren Falle sind die zugehörigen

Quadrate der Charaktere jeweilen zu halbieren. Damit im Zusammenhang steht, dass die Kolonnenzahl für D_{p2^z}, $S_{(p2^z)v}$, $C_{(p2^z)v}$ gerade die Hälfte derjenigen von $D_{(p2^z)h}$ ist, somit $[p \cdot 2^z + 6]/2$, während sie für C_{mh} zu $p \cdot 2^z + 2$ wird (kein Zusammenfall der E) und für C_m, S_m und S_m' zu $[p \cdot 2^z + 2]/2$.

Haupttabelle II.

Vorhandene Zeilen von Haupttabelle I in den Untersymmetrien.

(v bedeutet vorhanden, — fehlend).

IIa Wirtelige Klassen mit $z \geq 2$

$Z \geq 2$			$D_{p2^z h}$	D_{p2^z}	$S_{p2^z v} = D_{p2^z d}$	$C_{p2^z v}$	$C_{p2^z h}$	C_{p2^z}	S_{p2^z}
	Zahl der Kolonnen		$p2^z+4+\frac{4}{2}$	$\frac{p2^z}{2}+2+\frac{2}{2}$	$\frac{p2^z}{2}+2+\frac{2}{2}$	$\frac{p2^z}{2}+2+\frac{2}{2}$	$p2^z+\frac{4}{2}$	$\frac{p2^z}{2}+\frac{2}{2}$	$\frac{p2^z}{2}+\frac{2}{2}$
	Zahl der Operationen		$4p2^z$	$2p2^z$	$2p2^z$	$2p2^z$	$2p2^z$	$p2^z$	$p2^z$
Bezeichnung	Subkolonnenzahl	Faktor							
a	1	1	v	v	v	v	v	v	v
b	$\frac{p2^z}{4}$	2	v	v	–	v	v	v	–
c	1	1	v	v	v	v	v	v	v
d	$\frac{p(2^z-2)}{4}-\frac{1}{2}$	2	v	v	v	v	v	v	v
e	$\frac{p-1}{2}$	2	v	v	v	v	v	v	v
g_1	1	$\frac{p2^z}{2}$	v	v	v	–	–	–	–
g_2	1	$\frac{p2^z}{2}$	v	v	–	–	–	–	–
α	1	1	v	–	–	–	v	–	–
β	$\frac{p2^z}{4}$	2	v	–	v	–	v	–	v
γ	1	1	v	–	–	–	v	–	–
δ	$\frac{p(2^z-2)}{4}-\frac{1}{2}$	2	v	–	–	–	v	–	–
ε	$\frac{p-1}{2}$	2	v	–	–	–	v	–	–
σ_1	1	$\frac{p2^z}{2}$	v	–	–	v	–	–	–
σ_2	1	$\frac{p2^z}{2}$	v	–	v	v	–	–	–

IIb Wirtelige Klassen mit $z = 1$ oder $z = 0$

$Z = 1$ (d fehlt)			D_{2ph}	D_{2p}	$S_{2pv} = D_{ph}$	C_{2pv}	C_{2ph}	C_{2p}	$S_{2p} = C_{ph}$
	Zahl der Kolonnen		$2p+4+\frac{4}{2}$	$\frac{2p}{2}+2+\frac{2}{2}$	$\frac{2p}{2}+2+\frac{2}{2}$	$\frac{2p}{2}+2+\frac{2}{2}$	$2p+\frac{4}{2}$	$\frac{2p}{2}+\frac{2}{2}$	$\frac{2p}{2}+\frac{2}{2}$
	Zahl der Operationen		$4 \cdot 2p$	$2 \cdot 2p$	$2 \cdot 2p$	$2 \cdot 2p$	$2 \cdot 2p$	$2p$	$2p$
Bezeichnung	Subkolonnenzahl	Faktor							
a	1	1	v	v	v	v	v	v	v
b	$\frac{p2^z}{4}-\frac{1}{2}$	2	v	v	–	v	v	v	–
c	1	1	v	v	–	v	v	v	–
e	$\frac{p-1}{2}$	2	v	v	v	v	v	v	v
g_1	1	p	v	v	v	–	–	–	–
g_2	1	p	v	v	–	–	–	–	–
α	1	1	v	–	–	–	v	–	–
β	$\frac{p2^z}{4}-\frac{1}{2}$	2	v	–	v	–	v	–	v
γ	1	1	v	–	v	–	v	–	v
ε	$\frac{p-1}{2}$	2	v	–	–	–	v	–	–
σ_1	1	p	v	–	–	v	–	–	–
σ_2	1	p	v	–	v	v	–	–	–
$Z = 0$ (b, c, d fehlen)			D_{pd}	D_p	—	C_{pv}	C_{pi}	C_p	—
	Zahl der Kolonnen		$p+2+\frac{2}{2}$	$\frac{p}{2}+1+\frac{1}{2}$	—	$\frac{p}{2}+1+\frac{1}{2}$	$p+\frac{2}{2}$	$\frac{p}{2}+\frac{1}{2}$	—
	Zahl der Operationen		$4p$	$2p$	—	$2p$	$2p$	p	—
Bezeichnung	Subkolonnenzahl	Faktor							
a	1	1	v	v		v	v	v	
e	$\frac{p-1}{2}$	2	v	v		v	v	v	
g	1	p	v	v		–	–	–	
α	1	1	v	–		–	v	–	
ε	$\frac{p-1}{2}$	2	v	–		–	v	–	
σ	1	p	v	–		v	–	–	

Allgemein gilt:

Kolonnenzahl, Zeilenzahl, Rassenzahl, Typenzahl.

Symmetrie	C_p	$\underbrace{C_{2p}, C_{pi}, C_{ph}}$	$\underbrace{C_{pv}, D_p}$	$\underbrace{D_{pd}, D_{ph}, C_{2pv}, D_{2p}}$	$\underbrace{C_{2ph} = C_{2pi}}$
Zahl	$\frac{p+1}{2}$	$p+1$	$\frac{p+3}{2}$	$p+3$	$2p+2$

$$\underbrace{D_{2ph} = D_{2pi}}_{2p+6} \quad \underbrace{C_{p2^z}, S_{p2^z}}_{p^{z-1}+1} \quad \underbrace{C_{(p2^z)i} = C_{(p2^z)h}}_{p\,2^z+2} \quad \underbrace{C_{(p2^z)v}, D_{p2^z}, D_{(p2^{z-1})d}}_{p\,2^{z-1}+3}$$

$$\underbrace{D_{(p2^z)h} = D_{(p2^z)i}}_{p\,2+6}$$

Haupttabelle III.

Zusammenfall von Zeilen, sowie Bezeichnung der Schwingungsklassen in den Untergruppen von D_{2p^zh} und D_{pd}.

$Z \geq 1$	D_{p2^z}		S_{p2^zv}		C_{p2^zv}		C_{p2^zh}		C_{p2^z}		S_{p2^z}	
	A_1 (D_{p2^z})	$A_{1g} = A_{1u}$	A_{1g} (S_{p2^zv})	$A_{1g} = B_{1u}$	A' (C_{p2^zv})	$A_{1g} = A_{2u}$	A_g (C_{p2^zh})	$A_{1g} = A_{2g}$	A (C_{p2^z})	$A_{1g} = A_{2g} =$	A_g (S_{p2^z})	$A_{1g} = A_{2g} =$
	A_2 (C_{p2^z})	$A_{2g} = A_{2u}$	A_{1u} $(D_{p2^{z-1}})$	$A_{1u} = B_{1g}$	A'' (C_{p2^z})	$A_{1u} = A_{2g}$	A_u (C_{p2^z})	$A_{1u} = A_{2u}$		$= A_{1u} = A_{2u}$		$= B_{1u} = B_{2u}$
	B_1 $(D'_{p2^{z-1}})$	$B_{1g} = B_{1u}$	A_{2g} (S_{p2^z})	$A_{2g} = B_{2u}$	B' $(C'_{p2^{z-1}v})$	$B_{1g} = B_{2u}$	B_g $(C_{p2^{z-1}i})$	$B_{1g} = B_{2g}$	B $(C_{p2^{z-1}})$	$B_{1g} = B_{2g} =$	A_u $(C_{p2^{z-1}})$	$A_{1u} = A_{2u} =$
	B_2 $(D''_{p2^{z-1}})$	$B_{2g} = B_{2u}$	A_{2u} $(C_{p2^{z-1}v})$	$A_{2u} = B_{2g}$	B'' $(C''_{p2^{z-1}v})$	$B_{1u} = B_{2g}$	B_u (S_{p2^z})	$B_{1u} = B_{2u}$		$= B_{1u} = B_{2u}$		$= B_{1g} = B_{2g}$
	E_1	$E_{1g} = E_{1u}$	E'_1	$E_{1g} = E_{(y-1)u}$	E_1	$E_{1g} = E_{1u}$		kein Zusammenfall gegenüber Holoedrie, jedoch alle trennbar $\underline{E}$	$\underline{E}_1$	$E_{1g} = E_{1u}$	$\underline{E}'_1$	$E_{1g} = E_{(y-1)u}$
	E_2	$E_{2g} = E_{2u}$	E''_1	$E_{1u} = E_{(y-1)g}$	E_2	$E_{2g} = E_{2u}$			$\underline{E}_2$	$E_{2g} = E_{2u}$	$\underline{E}''_1$	$E_{1u} = E_{(y-1)g}$
	⋮	⋮	E'_2	$E_{2g} = E_{(y-2)u}$	⋮	⋮			⋮	⋮	$\underline{E}'_2$	$E_{2g} = E_{(y-2)u}$
	⋮	⋮	E''_2	$E_{2u} = E_{(y-2)g}$	⋮	⋮			⋮	⋮	$\underline{E}''_2$	$E_{2u} = E_{(y-2)g}$
	E_y	$E_{(y-1)g} = E_{(y-1)u}$	⋮	$Z > 1$ Mittelglied = $2\cos 90°$ = 0; $Z = 1$ Anzahl = $y-1$ gerade	$E_{(y-1)}$	$E_{(y-1)g} = E_{(y-1)u}$			$\underline{E}_{(y-1)}$	$E_{(y-1)g} = E_{(y-1)u}$	⋮	⋮
$Z = 0$ keine B	D_p				C_{pv}		C_{pi}		C_p		Ausgangssymmetrie D_{pd}	
	A_1 (D_p)	$A_{1g} = A_{1u}$			A' (C_{pv})	$A_{1g} = A_{2u}$	A_g (C_{pi})	$A_{1g} = A_{2g}$	A (C_p)	$A_{1g} = A_{2g} =$		
	A_2 (C_p)	$A_{2g} = A_{2u}$			A'' (C_p)	$A_{1u} = A_{2g}$	A_u (C_p)	$A_{1u} = A_{2u}$		$= A_{1u} = A_{2u}$		
	E_1	$E_{1g} = E_{1u}$			E_1	$E_{1g} = E_{1u}$		kein Zusammenfall, jedoch alle trennbar $\underline{E}$	$\underline{E}_1$	$E_{1g} = E_{1u}$		
	E_2	$E_{2g} = E_{2u}$			E_2	$E_{2g} = E_{2u}$			$\underline{E}_2$	$E_{2g} = E_{2u}$		

Symmetriegruppen mit gleicher Kolonnenzahl sind im weiteren Sinne isomorph zueinander (Vieldeutigkeit!).

Die Haupttabellen I, II, III enthalten somit in übersichtlicher Weise das Gesamtmaterial für alle nichtkubischen und nichtikosaedrischen Symmetriegruppen; sie ersetzen und ergänzen die vielen Einzeltabellen anderer Zusammenstellungen. Sie lösen die Aufgabe, die mit einer Grundsymmetrie verträglichen Klassen der Schwingungssysteme (Klassen oder Typen) sofort anzugeben.

In den einzig übrigbleibenden kubischen und ikosaedrischen Symmetrieklassen treten einige Besonderheiten auf, gebunden an das Vorhandensein von verschieden gerichteten drei-, vier- und fünfzähligen gleichwertigen Achsen, die zu weiteren Entartungen Veranlassung geben. In diesen Symmetriegruppen müssen jetzt zum Beispiel dreifach entartete Schwingungstypen möglich sein. Drei wechselweise orthogonal zueinander stehende entartete Schwingungen besitzen aus Symmetriegründen gleiche Frequenz (Tripelschwingung F). Es ist in diesem Falle stets möglich, einen Satz linearer Kombinationen dreier miteinander entarteter Schwingungen zu finden, von denen eine symmetrisch zur Entartungsachse ist und zwei andere sich so verhalten wie ein zweifach entartetes Paar. Somit wird der diesbezügliche Charakter zu $1 + 2 \cos x\, \varphi$.

Gegenüber einem Symmetriezentrum müssen alle dreifach zueinander entarteten Schwingungen symmetrisch oder alle antisymmetrisch sein ($+3$ oder -3), während gegenüber Spiegelebenen und Digyren eine Wahl so möglich ist, dass zwei Charaktere entgegengesetztes Vorzeichen haben, der dritte + oder — (Kombination $0+1$ und $0-1$). Weitere vierfach und fünffach entartete Schwingungen treten nur in den selten oder nie verwirklichten Ikosaedergruppen auf, so dass wir uns kurz fassen können. Vierfach entartete Schwingungen lassen sich aus zwei Paaren zweifach entarteter zusammensetzen. Dem Symmetriezentrum gegenüber sind die Charaktere alle positiv oder alle negativ ($+4$ und -4). Fünffach entartete Schwingungen sind darstellbar als zwei Paare zweifach entarteter + eine einfache symmetrische oder evtl. antisymmetrische Schwingung. Dem Symmetriezentrum gegenüber resultiert also $+5$ oder -5.

Wir müssen an dieser Stelle unser Vorgehen zur Darstellung der charakteristischen Werte einer Symmetriegruppe nochmals präzisieren, um Missverständnisse zu vermeiden. Ausgegangen sind wir von der geometrischen Anschauung und der Zerlegung der Schwingungsvektoren nach dem Orthogonalitätsgesetz. Die Aufgabe lautet: Es sind alle zu einer Grundsymmetrie isomorphen Klassen des Schwingungssystems zu finden und endgültig zu charakterisieren. Die Charaktere wurden (Cosinus der in Winkeln darstellbaren Zusatzkomponenten) so gewählt, dass sie genau den Charakteren irreduzibler Darstellungen entsprechen, ohne dass wir diesen Begriff nötig hatten. Dadurch ergaben sich in ausserordentlich einfacher Ableitung die gleichen Zahlentabellen, welche für einfache Krystallklassen schon lange benutzt wurden. Die Zusammenhänge wurden jedoch übersichtlicher. Für kubische und ikosaedrische Gruppen ist zusätzlich folgendes zu vermerken, was gleichfalls der Anschauung entnommen werden kann, jedoch etwas grösseres Vorstellungsvermögen erfordert:

a) Treten mehrere drei- oder vierzählige Achsen auf, so gibt es dreifach entartete Schwingungen F, die F-Klassen bilden. Für diese gilt, dass sich die Charaktere der zu den Entartungsachsen gehörigen Schwingungen berechnen nach $1 + 2 \cos x \cdot 360$ m.

b) Treten als Hauptentartungsachsen fünfzählige auf, so gibt es auch vierfach (G) und fünffach (H) entartete Schwingungen und entsprechende Klassen. Für die fünfzählige Achse werden die zugehörigen Charaktere berechnet zu:

$G = 2 \cos 72^0 + 2 \cos 144^0$ bzw. $2 \cos 144^0 + 2 \cos 288^0$ (d. h. zwei Paare zweifach entarteter Schwingungen).

$H = 1 +$ Charakter von G (zu G hinzukommend eine symmetrische Schwingung).

Geometrisch lässt sich zeigen, dass den in ikosaedrischen Gruppen gleichfalls vorhandenen Trigyren in G der Charakter $+1$ (zwei symmetrische Schwingungen + ein E-Paar), in H der Charakter -1 (zwei symmetrische, drei gewöhnlich entartete, also $2 + 3 \cdot \bar{1} = 2 - 3 = \bar{1}$) zukommen muss.

c) Ebenso ergibt sich in den geometrisch leicht deutbaren Punktgruppen des dreidimensionalen Raumes, dass für Digyren senkrecht zu Hauptentartungsachsen gilt:
Charakter in E = 0 (+ und –)

F = 0 ± 1 = ± 1 (d.h. ein Paar ±, dazu eine Schwingung + oder –).

Digyren nicht senkrecht zu Hauptentartungsachsen oder teils parallel, teils senkrecht dazu erhalten in:

E den Charakter + 2 (d. h. beide symmetrisch),

F stets den Charakter – 1 (d. h. zwei antisymmetrisch, eine symmetrisch),

G den Charakter 0 (d. h. zwei symmetrisch, zwei antisymmetrisch),

H den Charakter + 1 (d. h. drei symmetrisch, zwei antisymmetrisch).

d) Das Hinzufügen eines Symmetriezentrums spielt die gleiche Rolle wie in den zyklischen Gruppen.

e) Da ausserdem wegen der Orthogonalitätsbeziehungen zwischen den Charakteren eine Reihe von Relationen bestehen, ist es auch für kubische und ikosaedrische Gruppen sehr leicht, die gesamte Charakterendarstellung aufzustellen und zu überprüfen. Solche Sätze sind beispielsweise:

α) Die Quadratsumme der Charaktere jeder Vertikalkolonne ist gleich der Ordnungszahl N der Gesamtgruppe, dividiert durch die Zahl gleichartiger Operationen (Typenfaktor, z. B. für $6\,f_4$ ist dieser Faktor = 6). Multipliziert mit diesen Zahlen ergibt sich N. Dabei ist, wie auch in Satz β, zu beachten, dass bei zweifach entarteten trennbaren Schwingungen das Quadrat des zugehörigen Charakters zu halbieren ist.

β) Auch die Summe der Charakterenquadrate einer horizontalen Zeile ist (die Charakterenquadrate jeweilen multipliziert mit den zugehörigen Typenfaktoren) = N.

γ) Das Produkt entsprechender Charaktere zweier verschiedener Vertikalkolonnen ist = Null.

δ) Nennt man 2, 3, 4, 5 die Entartungsfaktoren für zwei-, drei-, vier-, fünffach entartete Schwingungen, so gilt ferner:

Die Summe der Charaktere selbst, multipliziert mit den zu den einzelnen Charakteren gehörigen Typenfaktoren und den zugehörigen Entartungsfaktoren (letzteres aber nur, wenn die entarteten Schwingungen nicht trennbar sind), ist in allen Kolonnen und in allen Zeilen = Null, ausgenommen die jeweilen links äusserste Kolonne f_1 (Identität) und die jeweilen oberste Zeile (totalsymmetrische oder Haupt-Darstellung) der einzelnen

Haupttabelle IV.

Charaktere kubischer Symmetrie.

	a	b	c	e	g	α	β	γ	ε	σ	Gewöhnliche Restsymmetrien für (Die Klammern zeigen das Zusammenfallen der Zeilen an)				
	$1 f_1$	$6 f_4$	$3 f_2$	$8 f_3$	$6 f_2$	$1 i_2$	$6 s_4$	$3 s_2$	$8 s'_6$	$6 s_2$	T	T_h	T_d	O	O_h
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	T	T_h	T_d	O	O_h
A_{1u}	1	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	T	T	T	O	O
A_{2g}	1	$\bar{1}$	1	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	1	$\bar{1}$	T	T_h	T	T	T_h
A_{2u}	1	$\bar{1}$	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	T	T	T_d	T	T_d
E_g	2	0	2	$\bar{1}$	0	2	0	2	$\bar{1}$	0	D_2	D_{2h}	D_2	D_2	D_{2h}
E_u	2	0	2	$\bar{1}$	0	$\bar{2}$	0	$\bar{2}$	1	0	D_2	D_2	D_2	D_2	D_2
F_{1g}	3	1	$\bar{1}$	0	$\bar{1}$	3	1	$\bar{1}$	0	$\bar{1}$	C_1	C_i	C_1	C_1	C_i
F_{1u}	3	1	$\bar{1}$	0	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{1}$	1	0	1	C_1	C_1	C'_1	C_1	C_1
F_{2g}	3	$\bar{1}$	$\bar{1}$	0	1	3	$\bar{1}$	$\bar{1}$	0	1	C_1	C_i	C'_1	C'_1	C'_i
F_{2u}	3	$\bar{1}$	$\bar{1}$	0	1	$\bar{3}$	1	1	0	$\bar{1}$	C_1	C_1	C_1	C'_1	C'_1

Es gehören zu: O_h: abcegαβγεσ, Kol-Z = 10, Ord-Z = 48, O: abceg, Kol-Z = 5, Ord-Z = 24, T_d: aceβσ, Kol-Z = 5, Ord.-Z = 24
T_h: aceαγε, Kol-Z = 6, Ord-Z = 24, T ace, Kol-Z = 3, Ord.-Z = 12; E-Schwingungen trennbar in T und T_h

Klassen. In diesen letztgenannten Reihen ist sie gleich der Ordnungszahl der Symmetriegruppe.

Wir erhalten so eine geometrisch anschauliche Darstellung der für Normalschwingungen in Frage kommenden Auswahlregeln, bei gegebener Symmetrie der Punktanordnung in Gleichgewichtslage. Der Beweis, dass diese Darstellung und Aufspaltung in Untergruppen für die betrachteten Fälle genau der besonders von *Frobenius*, *Schur* und *Burnside* entwickelten Darstellung endlicher Gruppen durch einfache irreduzible Charaktersysteme entspricht und somit den gleichen physikalischen Anwendungsbereich hat wie diese, ist nicht schwer zu erbringen, jedoch an dieser Stelle von keiner grossen Bedeutung.

Haupttabelle V.

Charaktere ikosaedrischer Symmetrie.

	a	e'_1	e'_2	e	c	α	β_1	β_2	ε	γ	Gewöhnl. Restsymmetrien für:	
	$1f_1$	$12f_5^1$	$12f_5^2$	$20f_3$	$15f_2$	$1i_2$	$12s_{10}^1$	$12s_{10}^3$	$20s'_6$	$15s_2$	I	I_h
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	I	I_h
A_u	1	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	I	I
F_{1g}	3	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	0	$\bar{1}$	3	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	0	$\bar{1}$	C_1	C_i
F_{1u}	3	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	0	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$-\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)$	$-\left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)$	0	1	C_1	C_1
F_{2g}	3	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	0	$\bar{1}$	3	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	0	$\bar{1}$	C_1	C_i
F_{2u}	3	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	0	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$-\left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)$	$-\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)$	0	1	C_1	C_1
G_1	4	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	0	4	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	0	C_1	C_i
G_2	4	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	0	$\bar{4}$	1	1	$\bar{1}$	0	C_1	C_1
H_1	5	0	0	$\bar{1}$	1	5	0	0	$\bar{1}$	1	C_1	C_i
H_2	5	0	0	$\bar{1}$	1	$\bar{5}$	0	0	1	$\bar{1}$	C_1	C_1
I enthält nur a, e'_1, e'_2, e, c also 5 Kolonnen und 5 Zeilen, somit 60 Operat.												

Zusammenfassung.

Durch Berücksichtigung aller genannten Regeln erhält man neben den Tabellen I bis III der einfachen Krystallklassen für O_h und I_h die bereits bekannten eindeutigen Charakterendarstellungen der Haupttabellen IV und V. Aus ihnen ergeben sich wiederum die Charakterendarstellungen der Untergruppen O, T_h, T_d, T bzw. I durch Kolonnenauswahl und Vereinigung der Zeilen mit gleichen zurückbleibenden Charakteren zu einem Typus. Damit ist in fünf Haupttabellen das gesamte Grundmaterial zur Gewinnung der symmetriebedingten Auswahlregeln zusammengefasst. Die nächste Aufgabe ist die der Berechnung der Freiheitsgrade, die in einer dritten Mitteilung erfolgt.

Krystallchemisches Laboratorium
der Eidg. Techn. Hochschule und Universität, Zürich.