

## 74. Symmetriecharaktere, Auswahlregeln und Abzählung der Normalschwingungen von Molekeln mit der Symmetrie $D_{5d}$

von E. Billeter und Hs. H. Günthard.

(26. I. 56.)

### 1. Einleitung.

Im Zusammenhang mit Arbeiten über die Schwingungsspektren von Cyclanen, insbesondere von Cyclodekan, benötigten wir die gruppentheoretischen Grundlagen der Vibrationsspektren von Molekeln mit der Symmetriegruppe  $D_{5d}$ . Da sich anscheinend keine expliziten Formeln für die Abzählung der zu den irreduziblen Darstellungen von  $D_{5d}$  gehörigen Normalschwingungen in der Literatur vorfinden, leiteten wir für diesen Fall Gleichungen ab, die erlauben

1. die Anzahl der Normalschwingungen jeder Spezies zu berechnen, wenn die Anzahl und Lage der eine Molekel aufbauenden Punktsätze bekannt sind;

2. die Infrarot- und *Raman*-Aktivität der Normalschwingungen und Kombinationstöne von  $D_{5d}$ -Molekeln zu bestimmen;

3. die Symmetrieeigenschaften mehrfach angeregter Normalschwingungen abzuleiten;

4. den Zusammenhang mit den Symmetrietypen von Normalschwingungen von Molekeln niedrigerer Symmetrie, wie sie durch isotope Substitution von  $D_{5d}$ -Molekeln entstehen können, festzulegen.

Ferner geben wir ein auf eine spezielle Basis bezogenes vollständiges System irreduzibler Darstellungen von  $D_{5d}$  in reeller Gestalt an, welches bei der Konstruktion von Symmetriekoordinaten von Nutzen sein mag. Der Vollständigkeit halber ist auch das vollständige Charakterensystem aufgeführt, obgleich dieses direkt aus dem von  $D_{5h}$  entnommen werden kann.

Die Methoden zur Ableitung folgen den von *Wigner*<sup>1)</sup> und *Placzek*<sup>2)</sup> angegebenen.

Die Bezeichnungen für die irreduziblen Darstellungen sowie die formelmässige Wiedergabe der Resultate schliessen sich an die Tab. von *Herzberg*<sup>3)</sup> an.

<sup>1)</sup> *E. Wigner*, Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren, Braunschweig 1931.

<sup>2)</sup> *G. Placzek*, Handbuch der Radiologie, herausgegeben von *E. Marx*, Bd. VI, 2, p. 205 ff., Leipzig 1934.

<sup>3)</sup> *G. Herzberg*, Molecular Spectra and Molecular Structure, Vol. II, Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules, New York 1945.

2. Gruppenelemente, Klasseneinteilung, Verwirklichung, irreduzible Darstellungen und Charactersystem.

2.11. Abstrakte Gruppe. Die Gruppe  $\mathcal{D}_{5d}$  bestehe aus einem Element  $C$  fünfter Ordnung,  $C^5 = E$ , und zwei Elementen  $S, T$  zweiter Ordnung,  $S^2 = E, T^2 = E$  und den folgenden Verknüpfungsvorschriften<sup>4)</sup>:

$$C^k S = S C^{-k} \quad C^k T = T C^k \quad S T = T S \quad k = 0, 1, 2, 3, 4$$

$\mathcal{D}_{5d}$  hat die Ordnung 20, und es gilt für die Elemente die Einteilung in 8 Klassen:

$$C^k S^i T^l \quad k = 0, 1, 2, 3, 4 \\ i, l = 0, 1$$

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_1 &= E & \mathcal{C}_5 &= T \\ \mathcal{C}_2 &= C, C^4 & \mathcal{C}_6 &= C T, C^4 T \\ \mathcal{C}_3 &= C^2, C^3 & \mathcal{C}_7 &= C^2 T, C^3 T \\ \mathcal{C}_4 &= C^k S & \mathcal{C}_8 &= C^k S T \end{aligned}$$

2.12. Verwirklichung. Die Punktsymmetriegruppe  $D_{5d}$  entsteht aus  $\mathcal{D}_{5d}$  durch die Verwirklichungen bezüglich eines kartesischen Parallelkoordinatensystems OXYZ:

- C: 5-zählige Drehungsachse  $C_5$  (z)
- S: 2-zählige Drehungsachse  $C_2$  (x)
- T: Symmetriezentrum im Punkt O i

2.21. Irreduzible Darstellungen von  $D_{5d}$  in reeller Gestalt. Sei  $\Phi = 2\pi/5$ , also  $\cos k\Phi = \cos(5-k)\Phi$   
 $\sin k\Phi = -\sin(5-k)\Phi$   
 für  $k = 0, 1, 2, 3, 4$ .

So erhält man die 8 irreduziblen Darstellungen von  $D_{5d}$  durch reelle Matrizen in folgender Gestalt bezüglich des in 2.12 fixierten Koordinatensystems:

Tabelle 1.

	$\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2, \mathcal{C}_3$ $C_5^k$	$\mathcal{C}_4$ $C_5^k C_2$
$A_{1g}$	1	1
$A_{1u}$	1	1
$A_{2g}$	1	-1
$A_{2u}$	1	-1
$E_{1g}$	$\begin{pmatrix} \cos k\Phi & -\sin k\Phi \\ \sin k\Phi & \cos k\Phi \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \cos k\Phi & \sin k\Phi \\ \sin k\Phi & -\cos k\Phi \end{pmatrix}$
$E_{1u}$	$\begin{pmatrix} \cos k\Phi & -\sin k\Phi \\ \sin k\Phi & \cos k\Phi \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \cos k\Phi & \sin k\Phi \\ \sin k\Phi & -\cos k\Phi \end{pmatrix}$
$E_{2g}$	$\begin{pmatrix} \cos 2k\Phi & -\sin 2k\Phi \\ \sin 2k\Phi & \cos 2k\Phi \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \cos 2k\Phi & \sin 2k\Phi \\ \sin 2k\Phi & -\cos 2k\Phi \end{pmatrix}$
$E_{2u}$	$\begin{pmatrix} \cos 2k\Phi & -\sin 2k\Phi \\ \sin 2k\Phi & \cos 2k\Phi \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \cos 2k\Phi & \sin 2k\Phi \\ \sin 2k\Phi & -\cos 2k\Phi \end{pmatrix}$

<sup>4)</sup> H. Margenau & G. M. Murphy, The Mathematics of Physics and Chemistry, p. 552ff., New York 1949.

Tabelle 1 (Fortsetzung).

	$\zeta_5, \zeta_6, \zeta_7$ $C_5^k i$	$\zeta_8$ $C_5^k C_2 i$
$A_{1g}$	1	1
$A_{1u}$	-1	-1
$A_{2g}$	1	-1
$A_{2u}$	-1	1
$E_{1g}$	$\begin{pmatrix} \cos k\Phi & -\sin k\Phi \\ \sin k\Phi & \cos k\Phi \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \cos k\Phi & \sin k\Phi \\ \sin k\Phi & -\cos k\Phi \end{pmatrix}$
$E_{1u}$	$\begin{pmatrix} -\cos k\Phi & \sin k\Phi \\ -\sin k\Phi & -\cos k\Phi \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\cos k\Phi & -\sin k\Phi \\ -\sin k\Phi & \cos k\Phi \end{pmatrix}$
$E_{2g}$	$\begin{pmatrix} \cos 2k\Phi & -\sin 2k\Phi \\ \sin 2k\Phi & \cos 2k\Phi \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \cos 2k\Phi & \sin 2k\Phi \\ \sin 2k\Phi & -\cos 2k\Phi \end{pmatrix}$
$E_{2u}$	$\begin{pmatrix} -\cos 2k\Phi & \sin 2k\Phi \\ -\sin 2k\Phi & -\cos 2k\Phi \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\cos 2k\Phi & -\sin 2k\Phi \\ -\sin 2k\Phi & \cos 2k\Phi \end{pmatrix}$

Man kann diese Darstellungen direkt den Darstellungen der zwei-dimensionalen Drehspiegelungsgruppe  $R^{\pm 2}$  entnehmen, wenn man die Gruppenelemente der Gruppen  $D_5$  und  $C_1$  als Abbildungsoperatoren der Grundvektoren auffasst und für die Konstruktion der Darstellung die Gleichung  $D_{5d} = D_5 \times C_1$  benutzt. Da jedes Element von  $D_5$  mit jedem Element von  $C_1$  vertauschbar ist, erhält man alle irreduziblen Darstellungen von  $D_{5d}$  auf diese Weise.

2.22. Das System der Charaktere dieses vollständigen Systems irreduzibler Darstellungen ist demnach

Tabelle 2.

	$\zeta_1$	$\zeta_2$	$\zeta_3$	$\zeta_4$	$\zeta_5$	$\zeta_6$	$\zeta_7$	$\zeta_8$	
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	
$A_{1u}$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	
$A_{2g}$	1	1	1	-1	1	1	1	-1	$R_z$
$A_{2u}$	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	$T_z$
$E_{1g}$	2	$2 \cos \Phi$	$2 \cos 2\Phi$	0	2	$2 \cos \Phi$	$2 \cos 2\Phi$	0	$R_x R_y$
$E_{1u}$	2	$2 \cos \Phi$	$2 \cos 2\Phi$	0	-2	$-2 \cos \Phi$	$-2 \cos 2\Phi$	0	$T_x T_y$
$E_{2g}$	2	$2 \cos 2\Phi$	$2 \cos \Phi$	0	2	$2 \cos 2\Phi$	$2 \cos \Phi$	0	
$E_{2u}$	2	$2 \cos 2\Phi$	$2 \cos \Phi$	0	-2	$-2 \cos 2\Phi$	$-2 \cos \Phi$	0	

2.3. Irreduzible Bestandteile der direkten Produkte irreduzibler Darstellungen von  $D_{5d}$ . Man erhält für die Bestandteile von Kompositionen von A- und E-Darstellungen durch Anwendung der Gleichungen<sup>5)</sup>

$$\Xi(\Gamma^{(i)} \times \Gamma^{(j)}) = \chi(\Gamma^{(i)}) \chi(\Gamma^{(j)})$$

$$c_i = \frac{1}{g} \sum_{r=1}^s \tau_r \chi^{(i)}(\zeta_r) \Xi(\zeta_r)$$

die Resultate in den Tab. 3, 4, 5 und 6.

<sup>5)</sup> Siehe z. B. H. Margenau & G. M. Murphy<sup>4)</sup>, S. 537 und S. 535, Formel (15).

2.31. Direkte Produkte der eindimensionalen Darstellungen.

Tabelle 3.

$A_{1g} \times \Gamma^{(j)} = \Gamma^{(j)}$	$A_{1u} \times A_{2g} = A_{2u}$
$\Gamma^{(j)} \times \Gamma^{(j)} = A_{1g}$	$A_{1u} \times A_{2u} = A_{2g}$
$\Gamma^{(j)} = A_{1g}, A_{1u}, A_{2g}, A_{2u}$	$A_{2g} \times A_{2u} = A_{1u}$

2.32. Direkte Produkte von 1- und 2-dimensionalen Darstellungen.

Tabelle 4.

$$A_{1g} \times E_{kg} = E_{kg}; A_{1u} \times E_{kg} = E_{ku}; A_{1g} \times E_{ku} = E_{ku}; A_{1u} \times E_{ku} = E_{kg}.$$

2.33. Direkte Produkte von E-Darstellungen ohne Identifikation.

Tabelle 5.

$E_{1g} \times E_{1g} = A_{1g} \dot{+} A_{2g} \dot{+} E_{2g}$	$E_{1u} \times E_{1u} = A_{1g} \dot{+} A_{2g} \dot{+} E_{2g}$	$E_{2g} \times E_{2g} = A_{1g} \dot{+} A_{2g} \dot{+} E_{1g}$
$E_{1g} \times E_{1u} = A_{1u} \dot{+} A_{2u} \dot{+} E_{2u}$	$E_{1u} \times E_{2g} = E_{1u} \dot{+} E_{2u}$	$E_{2g} \times E_{2u} = A_{1u} \dot{+} A_{2u} \dot{+} E_{1u}$
$E_{1g} \times E_{2g} = E_{1g} \dot{+} E_{2g}$	$E_{1u} \times E_{2u} = E_{1g} \dot{+} E_{2g}$	
$E_{1g} \times E_{2u} = E_{1u} \dot{+} E_{2u}$		$E_{2u} \times E_{2u} = A_{1g} \dot{+} A_{2g} \dot{+} E_{1g}$

2.34. Direkte Produkte von E-Darstellungen mit Identifikation.

Tabelle 6.

$E_{1g}^2 = A_{1g} \dot{+} E_{2g}$	$E_{2g}^2 = A_{1g} \dot{+} E_{1g}$
$E_{1g}^3 = E_{1g} \dot{+} E_{2g}$	$E_{2g}^3 = E_{1g} \dot{+} E_{2g}$
$E_{1g}^4 = A_{1g} \dot{+} E_{1g} \dot{+} E_{2g}$	$E_{2g}^4 = A_{1g} \dot{+} E_{1g} \dot{+} E_{2g}$
$E_{1u}^2 = A_{1g} \dot{+} E_{2g}$	$E_{2u}^2 = A_{1g} \dot{+} E_{1g}$
$E_{1u}^3 = E_{1u} \dot{+} E_{2u}$	$E_{2u}^3 = E_{1u} \dot{+} E_{2u}$
$E_{1u}^4 = A_{1g} \dot{+} E_{1g} \dot{+} E_{2g}$	$E_{2u}^4 = A_{1g} \dot{+} E_{1g} \dot{+} E_{2g}$

3. Abzählung der Normalschwingungen.

3.11. Zähligkeit der Punktlagen. Denkt man sich eine Molekel der Symmetrie  $D_{5d}$  aus Sätzen äquivalenter Massenpunkte zusammengesetzt, so lassen sich folgende Punktlagen bezüglich der Symmetrieelemente unterscheiden:

Tabelle 7.

Lage bzgl. Sym.-Element .	allg	$C_2(x)$	$S(y, z)$	$C_5(z)$	i
Zähligkeit . . . . .	20	10	10	2	1
Koord. des Repräsentanten	x y z	x 0 0	0 y z	0 0 z	0 0 0

3.12. Darstellung  $\Gamma_3$  eines 3dimensionalen Vektors unter  $D_{5d}$ . Sind x, y, z die Komponenten eines Vektors (x) bezüglich des Koordinatensystems OXYZ, so erzeugen die Operatoren von  $D_{5d}$

als Abbildungen von  $(x)$  aufgefasst eine 3dimensionale Darstellung  $\Gamma_3$  durch orthogonale Matrizen von  $D_{5d}$ . Die (reduzible) Darstellung  $\Gamma_3$  besteht aus folgenden Matrizen:

$$\begin{aligned} \Gamma_3(E) &= E & \Gamma_3(i) &= -\begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix} \\ \Gamma_3(C_5^k(z)) &= \begin{pmatrix} \cos k\Phi & -\sin k\Phi & 0 \\ \sin k\Phi & \cos k\Phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \Gamma_3(C_5^k(z) i) &= \begin{pmatrix} -\cos k\Phi & \sin k\Phi & 0 \\ -\sin k\Phi & -\cos k\Phi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \Gamma_3(C_5^k(z) C_2(x)) &= \begin{pmatrix} \cos k\Phi & \sin k\Phi & 0 \\ \sin k\Phi & -\cos k\Phi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \Gamma_3(C_5^k(z) C_2(x) i) &= \begin{pmatrix} -\cos k\Phi & -\sin k\Phi & 0 \\ -\sin k\Phi & \cos k\Phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die Ortsvektoren  $(x')$  eines Satzes werden hieraus erhalten durch Abbildung der in Tab. 7 angegebenen Ortsvektoren  $(x)$  der Repräsentanten der verschiedenen Sätze:

$$(x') = \Gamma_3(G)(x)$$

3.2. Wir bezeichnen mit  $m$ ,  $m_d$ ,  $m_2$ ,  $m_{10}$  und  $m_0$ , bzw. die Anzahl der Sätze äquivalenter Punkte in allgemeiner Lage, auf diagonalen Spiegelebenen, auf zweizählige Achsen, auf der Pentagyre und im Symmetriezentrum, welche eine Molekel aufbauen. Dann ergeben sich für die Anzahl der Normalschwingungen jeder Spezies die folgenden Formeln<sup>6)7)</sup>:

Tabelle 8.

$D_{5d}$ ( $N = 20m + 10m_d$ $+ 10m_2 + 2m_{10}$ $+ m_0$ )	$A_{1g}$	$3m + 2m_d + m_2 + m_{10} + m_0$
	$A_{1u}$	$3m + m_d + m_2$
	$A_{2g}$	$3m + m_d + 2m_2 - 1$
	$A_{2u}$	$3m + 2m_d + 2m_2 + m_{10} + m_0 - 1$
	$E_{1g}$	$6m + 3m_d + 3m_2 + m_{10} - 1$
	$E_{1u}$	$6m + 3m_d + 3m_2 + m_{10} + m_0 - 1$
	$E_{2g}$	$6m + 3m_d + 3m_2$
	$E_{2u}$	$6m + 3m_d + 3m_2$

#### 4. Auswahlregeln für Schwingungsspektren für $D_{5d}$ -Molekeln.

4.1. Berechnet man die irreduziblen Bestandteile der Darstellungen des Dipolmoments  $\vec{M}$  und des Polarisierbarkeitstensors  $\alpha = (\alpha_{ik})$ , so erhält man die folgende Tab. für die Zugehörigkeit der Komponenten von  $\vec{M}$  und  $\alpha$  zu den irreduziblen Darstellungen von  $D_{5d}$ :

<sup>6)</sup> Die Bezeichnungen sind in Anlehnung an *G. Herzberg*<sup>3)</sup> gewählt.

<sup>7)</sup> Die Anzahl der zu jeder irreduziblen Darstellung von  $D_{5d}$  gehörigen Normalschwingungen jeder Satzsorte wurden in der üblichen Weise durch Reduktion des direkten Produkts von  $\Gamma_3$  und jenen Darstellungen erhalten, die durch die Permutationen der Punkte eines Satzes unter dem Einfluss der Operatoren von  $D_{5d}$  entstehen.

Tabelle 9.

$M_x$	$E_{1g}$
$M_y$	$E_{1u}$
$M_z$	$A_{2u}$
$\alpha_{xx}$	$A_{1g} + E_{2g}$
$\alpha_{yy}$	$A_{1g} + E_{2g}$
$\alpha_{zz}$	$A_{1g}$
$\alpha_{xy}$	$E_{2g}$
$\alpha_{xz}$	$E_{1g}$
$\alpha_{yz}$	$E_{1g}$

Man erhält hieraus die Aktivität von Infrarot- bzw. Raman-Übergängen zwischen den Schwingungszuständen  $\psi_{v''}$  und  $\psi_{v'}$  durch Bestimmung der Anzahl  $C_{A_{1g}}$ , in welchem  $A_{1g}$  im direkten Produkt

$$\Gamma(\psi_{v''}) \times \Gamma(\bar{M}) \times \Gamma(\psi_{v'})$$

bzw.

$$\Gamma(\psi_{v''}) \times \Gamma(\alpha) \times \Gamma(\psi_{v'})$$

vorkommt<sup>8)</sup>. Ist  $C_{A_{1g}} = 0$ , so ist der Übergang verboten. Man benützt zur Bestimmung von  $C_{A_{1g}}$  zweckmässig die Tab. 3, 4, 5 und 6. Speziell ergibt sich für die Übergänge vom Schwingungsgrundzustand aus, dass die Übergänge  $A_{1g} \rightarrow A_{2u}$  (parallel polarisiert) und  $A_{1g} \rightarrow E_{1u}$  (senkrecht polarisiert) infrarotaktiv sind, während die Übergänge  $A_{1g} \rightarrow A_{1g}$ ,  $A_{1g} \rightarrow E_{1g}$  und  $A_{1g} \rightarrow E_{2g}$  Raman-aktiv sind.

4.2. In analoger Weise bestimmt man mit Hilfe von Tab. 9 die Symmetrie mehrfach angeregter Schwingungszustände. Sind hierbei alle entarteten Normalschwingungen höchstens einfach angeregt, finden die Tab. 3, 4 und 5 Anwendung. Enthält ein Schwingungszustand mehrfach angeregte entartete Normalschwingungen, so ist gleichzeitig auch die Tab. 6 (für Kompositionen mit Identifikation) zu benutzen. Für die Anwendung verweisen wir auf *G. Herzberg*<sup>9)</sup>, Tab. 31, 32 und 33.

### 5. Zusammenhang der Spezies der Normalschwingungen von $D_{5d}$ -Molekeln mit denjenigen von isotopen Molekeln.

5.1. Wird durch isotope Substitution die Symmetrie einer  $D_{5d}$ -Molekel auf eine der Untergruppen  $H$  von  $D_{5d}$  erniedrigt, so gehören die Normalschwingungen der isotopen Molekel zu einer der irreduziblen Darstellungen von  $H$ . Dabei gehen die Normalschwingungen einer bestimmten Spezies der vollsymmetrischen Molekel in Normalschwingungen bestimmter Spezies von  $H$  über. Der Zusammenhang der Spezies (irreduziblen Darstellungen) für den Übergang von  $D_{5d}$ -Symmetrie auf eine der Symmetrien  $H$  ist in Tab. 10 aufgeführt. Dabei kommen als Untergruppen  $H$  die folgenden Gruppen in Betracht:

$$D_5, C_{5v}, C_{51}, C_5, C_{2h}, C_2, C_s, C_1, C_1$$

<sup>8)</sup> Siehe *G. Herzberg*<sup>3)</sup>, S. 253.

<sup>9)</sup> *G. Herzberg*<sup>3)</sup>, S. 126, 127, 129.

## 5.2.

Tabelle 10.

$D_{5d}$	$D_5$	$C_{5v}$	$C_{5i}$	$C_5$	$C_{2h}$	$C_2$	$C_s$	$C_1$
$A_{1g}$	$A_1$	$A_1$	$A_g$	$A$	$A_g$	$A$	$A'$	$A_g$
$A_{1u}$	$A_1$	$A_2$	$A_u$	$A$	$A_u$	$A$	$A''$	$A_u$
$A_{2g}$	$A_2$	$A_2$	$A_g$	$A$	$B_u$	$B$	$A''$	$A_g$
$A_{2u}$	$A_2$	$A_1$	$A_u$	$A$	$B_g$	$B$	$A'$	$A_u$
$E_{1g}$	$E_1$	$E_1$	$E_{1g}$	$E_1$	$A_g \dot{+} B_g$	$A \dot{+} B$	$A' \dot{+} A''$	$2 A_g$
$E_{1u}$	$E_1$	$E_1$	$E_{1u}$	$E_1$	$A_u \dot{+} B_g$	$A \dot{+} B$	$A' \dot{+} A''$	$2 A_u$
$E_{2g}$	$E_2$	$E_2$	$E_{2g}$	$E_2$	$A_g \dot{+} B_u$	$A \dot{+} B$	$A' \dot{+} A''$	$2 A_g$
$E_{2u}$	$E_2$	$E_2$	$E_{2u}$	$E_2$	$A_u \dot{+} B_g$	$A \dot{+} B$	$A' \dot{+} A''$	$2 A_u$

Wir danken dem *Schweizerischen Nationalfonds* für die Unterstützung dieser Arbeit (Projekt 201).

## SUMMARY.

To simplify the calculation of group theoretical features of vibrational spectra of molecules with the symmetry  $D_{5d}$ , tables and formulas have been given for a complete system of irreducible real representations and the complete system of irreducible characters. Furthermore the irreducible components of compositions of irreducible representations have been calculated, since the compositions represent the symmetry of excited vibrational levels. Explicite formulas for the determination of the number of normal vibrations of each species, the symmetry types of the components of the electric dipole moment and the electric polarizability tensor are given. To correlate the vibrational spectra of  $D_{5d}$  molecules and their isotopic derivatives tables connecting the symmetry species of  $D_{5d}$  and the subgroups of  $D_{5d}$  are collected.

Organisch-chemisches Laboratorium  
der Eidg. Techn. Hochschule Zürich.

## 75. Über eine Methode zur gleichzeitigen mikroanalytischen Bestimmung des C-, H- und N-Gehaltes organischer Verbindungen mit einer Einwage.

(Vorläufige Mitteilung)

von **W. Schöniger**.

(11. II. 56.)

Für eine gleichzeitige C-, H- und N-Bestimmung in organischen Substanzen kommt eine Kombination der beiden bisher gebräuchlichen Verfahren (CH-Bestimmung gravimetrisch nach *Pregl*, N-Bestimmung gasvolumetrisch nach *Dumas-Pregl*) nicht in Frage,