

Institut für physikalische Chemie der Universität Frankfurt

## Ermittlung der $F$ - und $G$ -Matrizelemente für achtfach koordinierte Verbindungen vom Typ des archimedischen Antiprismas

Von

H. L. SCHLÄFER und H. F. WAGGESTIAN

Als Grundlage für eine Deutung der Schwingungsspektren des Kaliumoctocyanomolybdats wird für ein Molekül der Symmetrie  $D_{4d}$  ein Satz orthonormierter innerer Symmetriekoordinaten angegeben. Die Elemente der  $F$ - und  $G$ -Matrix werden nach der Methode von WILSON [8, 9] berechnet.

A set of orthonormalized internal symmetry coordinates for a molecule of  $D_{4d}$  symmetry is given as a basis for the interpretation of the vibration spectra of potassium octocyanomolybdate. The  $F$  and  $G$  matrix elements are calculated by WILSON's [8, 9] method.

Un jeu de coordonnées intramoléculaires et orthonormées pour la symétrie  $D_{4d}$  est donné afin d'avoir une base pour l'interprétation des spectres vibratoires du molybdate octocyanuré de potassium. Les éléments des matrices  $F$  et  $G$  sont calculés d'après WILSON [8, 9].

Die Arbeiten von STAMMREICH und SALA [7] haben die Diskussion um die Struktur des Kaliumoctocyanomolybdat(IV),  $K_4 [Mo(CN)_8] \cdot 2 H_2O$ , erneut belebt. Danach scheinen im gelösten Zustand die Ionen  $[Mo(CN)_8]^{4-}$  eine antiprismatische Struktur (Symmetrie  $D_{4d}$ ) zu besitzen. Für das kristallisierte Dihydrat haben dagegen neuere röntgenographische Untersuchungen von HOARD und SILVERTON [4] die alten Ergebnisse von HOARD und NORDSIECK [3] bestätigt, wonach das Ion eine dodekaedrische Struktur der Symmetrie  $D_{2d}$  besitzt.

Da eine ligandenfeldtheoretische Rechnung, die von GLEIMANN [2] auf Grund eines  $D_{4d}$ -Modells vorgenommen wurde, zu guter Übereinstimmung mit den von KÖNIG [5] gemessenen Elektronenspektren geführt hat, schien es von Interesse, auch die Wilsonsche Methode [8, 9] der  $F$ - und  $G$ -Matrizen auf das Modell des archimedischen Antiprismas (Symmetrie  $D_{4d}$ ) anzuwenden. Die entsprechenden Rechnungen für die Symmetrie  $D_{2d}$  wurden bereits von SALVETTI [6] durchgeführt.

### Das Modell und die verwendeten inneren Koordinaten

Das Ion  $[Mo(CN)_8]^{4-}$  besteht aus 17 Atomen. Nach Abzug der Freiheitsgrade der Translation und Rotation bleiben 45 innere Freiheitsgrade.

Für die Berechnung wurde die Konfiguration eines idealen archimedischen Antiprismas angenommen, bei dem alle Kanten von gleicher Länge sind. Die  $CN$ -Ionen befinden sich in den Ecken und bilden lineare  $Mo-C-N$ -Ketten gleicher Länge. Das archimedische Antiprisma wird von 8 gleichseitigen Dreiecken und zwei Quadraten begrenzt. Man erhält ein archimedisches Antiprisma, wenn man zwei gegenüberliegende Flächen eines Würfels (Kantenlänge  $a$ ) um  $45^\circ$  um die

durch die Flächenmitten gehende Achse gegeneinander dreht. Damit alle Kanten gleich lang werden, müssen die beiden Flächen noch auf den Abstand  $\frac{a}{\sqrt{2}}$  genähert werden (gestauchtes Antiprisma).

Bei der Symmetrie  $D_{4d}$  spaltet die Säkulargleichung des Schwingungsproblems in folgende Rassen auf (Bezeichnungen nach [9], S. 328):

$$\Gamma = 4 A_1 + A_2 + 2 B_1 + 4 B_2 + 6 E_1 + 6 E_2 + 5 E_3.$$

Davon sind die Schwingungen der Rassen  $A_1$ ,  $E_2$  und  $E_3$  Raman-aktiv, die der Rassen  $E_1$  und  $B_2$  infrarotaktiv. Ramanlinien, die zu  $A_1$  gehören, sind polarisiert.

Ein geeigneter Satz innerer Koordinaten ist gegeben durch:

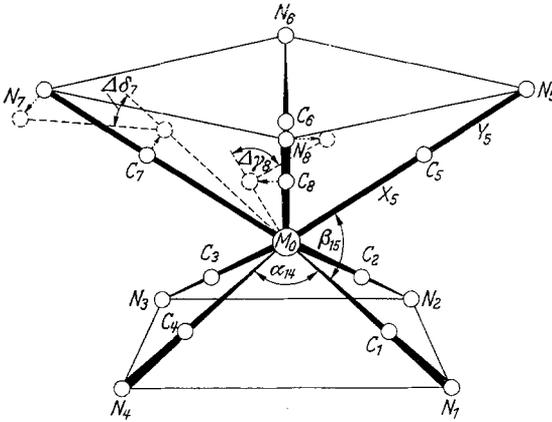


Fig. 1. Bezeichnung der Atome und Lage der inneren Koordinaten

1. die Änderungen der Abstände  $Mo - C_i$  ( $i = 1 - 8$ ):  $\Delta x_1, \dots, \Delta x_8$ ;

2. die Änderungen der Abstände  $C_i - N_i$ :  $\Delta y_1, \dots, \Delta y_8$ ;

3. die Änderungen der Winkel  $C - Mo - C$ , die eine Quadratseite einschließen:  $\Delta \alpha_{12}, \Delta \alpha_{23}, \Delta \alpha_{34}, \Delta \alpha_{14}, \Delta \alpha_{56}, \Delta \alpha_{67}, \Delta \alpha_{78}, \Delta \alpha_{58}$ ;

4. die Änderungen der Winkel  $C - Mo - C$ , die eine der Dreiecksseiten einschließen:  $\Delta \beta_{15}, \Delta \beta_{25}, \Delta \beta_{26}, \Delta \beta_{36}, \Delta \beta_{37}, \Delta \beta_{47}, \Delta \beta_{48}, \Delta \beta_{18}$ ;

5. die Deformationen der gestreckten Winkel  $Mo - C_i - N_i$ , die in der Spiegelebene liegen, die durch  $C_i$  und  $N_i$  hindurchgeht:  $\Delta \delta_1, \dots, \Delta \delta_8$ ;

6. die zu den  $\Delta \delta_i$  senkrechten Deformationen der gestreckten Winkel  $Mo - C_i - N_i$ :  $\Delta \gamma_1, \dots, \Delta \gamma_8$ .

Die Deformationen  $\Delta \delta_i$  nehmen positive Werte an, wenn sich  $C_i$  aus dem Antiprisma herausbewegt.  $\Delta \gamma_i$  ist positiv, wenn sich das beteiligte  $C$ -Atom in Richtung auf das benachbarte mit dem um eins kleineren Index bewegt.

Die Bezeichnung der Atome und die Lage der inneren Koordinaten sind aus Fig. 1 zu ersehen.

Aus diesen inneren Koordinaten läßt sich der in Tab. 1 angegebene Satz von orthonormierten Symmetriekoordinaten gewinnen. Zu diesen 48 Symmetriekoordinaten gehören drei Nebenbedingungen:

$$S_{\alpha}^{A_1} + \frac{1}{1 + \frac{1}{\sqrt{2}}} S_{\beta}^{A_1} = 0; \quad S_{\alpha_1}^{E_3} - \sqrt{4 - 2\sqrt{2}} S_{\beta_1}^{E_3} = 0; \quad S_{\alpha_2}^{E_3} - \sqrt{4 - 2\sqrt{2}} S_{\beta_2}^{E_3} = 0.$$

### F-Matrix

Die vollständige harmonische Potentialfunktion enthält 1176 Glieder. Infolge der vergleichsweise hohen Symmetrie treten jedoch nur 100 verschiedene Kraftkonstanten auf. Aus diesen erhält man die Elemente der  $F$ -Matrix (Tab. 2).

Tabelle 1. Symmetriekoordinaten

$$\begin{aligned}
A_1 \quad S_x^{A_1} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta x_1 + \Delta x_2 + \Delta x_3 + \Delta x_4 + \Delta x_5 + \Delta x_6 + \Delta x_7 + \Delta x_8) \\
S_y^{A_1} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta y_1 + \Delta y_2 + \Delta y_3 + \Delta y_4 + \Delta y_5 + \Delta y_6 + \Delta y_7 + \Delta y_8) \\
S_\alpha^{A_1} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta \alpha_{12} + \Delta \alpha_{23} + \Delta \alpha_{34} + \Delta \alpha_{14} + \Delta \alpha_{56} + \Delta \alpha_{67} + \Delta \alpha_{78} + \Delta \alpha_{58}) \\
S_\beta^{A_1} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta \beta_{15} + \Delta \beta_{25} + \Delta \beta_{26} + \Delta \beta_{36} + \Delta \beta_{37} + \Delta \beta_{47} + \Delta \beta_{48} + \Delta \beta_{18}) \\
S_\delta^{A_1} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta \delta_1 + \Delta \delta_2 + \Delta \delta_3 + \Delta \delta_4 + \Delta \delta_5 + \Delta \delta_6 + \Delta \delta_7 + \Delta \delta_8) \\
A_2 \quad S_\gamma^{A_2} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta \gamma_1 + \Delta \gamma_2 + \Delta \gamma_3 + \Delta \gamma_4 + \Delta \gamma_5 + \Delta \gamma_6 + \Delta \gamma_7 + \Delta \gamma_8) \\
B_1 \quad S_\beta^{B_1} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta \beta_{15} + \Delta \beta_{26} + \Delta \beta_{37} + \Delta \beta_{48} - \Delta \beta_{18} - \Delta \beta_{25} - \Delta \beta_{36} - \Delta \beta_{47}) \\
S_\gamma^{B_1} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta \gamma_1 + \Delta \gamma_2 + \Delta \gamma_3 + \Delta \gamma_4 - \Delta \gamma_5 - \Delta \gamma_6 - \Delta \gamma_7 - \Delta \gamma_8) \\
B_2 \quad S_x^{B_2} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta x_1 + \Delta x_2 + \Delta x_3 + \Delta x_4 - \Delta x_5 - \Delta x_6 - \Delta x_7 - \Delta x_8) \\
S_y^{B_2} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta y_1 + \Delta y_2 + \Delta y_3 + \Delta y_4 - \Delta y_5 - \Delta y_6 - \Delta y_7 - \Delta y_8) \\
S_\alpha^{B_2} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta \alpha_{12} + \Delta \alpha_{23} + \Delta \alpha_{34} + \Delta \alpha_{14} - \Delta \alpha_{56} - \Delta \alpha_{67} - \Delta \alpha_{78} - \Delta \alpha_{58}) \\
S_\delta^{B_2} &= \frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta \delta_1 + \Delta \delta_2 + \Delta \delta_3 + \Delta \delta_4 - \Delta \delta_5 - \Delta \delta_6 - \Delta \delta_7 - \Delta \delta_8) \\
E_1 \quad S_{x_1}^{E_1} &= \frac{1}{2} [\Delta x_1 - \Delta x_3 + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta x_5 - \Delta x_6 - \Delta x_7 + \Delta x_8)] \\
S_{x_2}^{E_1} &= \frac{1}{2} [\Delta x_2 - \Delta x_4 + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta x_5 + \Delta x_6 - \Delta x_7 - \Delta x_8)] \\
S_{y_1}^{E_1} &= \frac{1}{2} [\Delta y_1 - \Delta y_3 + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta y_5 - \Delta y_6 - \Delta y_7 + \Delta y_8)] \\
S_{y_2}^{E_1} &= \frac{1}{2} [\Delta y_2 - \Delta y_4 + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta y_5 + \Delta y_6 - \Delta y_7 - \Delta y_8)] \\
S_{\alpha_1}^{E_1} &= \frac{1}{2} [\Delta \alpha_{58} - \Delta \alpha_{67} + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \alpha_{12} - \Delta \alpha_{23} - \Delta \alpha_{34} + \Delta \alpha_{14})] \\
S_{\alpha_2}^{E_1} &= \frac{1}{2} [\Delta \alpha_{56} - \Delta \alpha_{78} + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \alpha_{12} + \Delta \alpha_{23} - \Delta \alpha_{34} - \Delta \alpha_{14})] \\
S_{\beta_1}^{E_1} &= \frac{1}{2\sqrt{2+\sqrt{2}}} [(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}) (\Delta \beta_{15} + \Delta \beta_{18} - \Delta \beta_{36} - \Delta \beta_{37}) + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \beta_{25} - \Delta \beta_{26} - \Delta \beta_{47} + \Delta \beta_{48})] \\
S_{\beta_2}^{E_1} &= \frac{1}{2\sqrt{2+\sqrt{2}}} [(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}) (\Delta \beta_{25} + \Delta \beta_{26} - \Delta \beta_{47} - \Delta \beta_{48}) + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \beta_{15} - \Delta \beta_{18} + \Delta \beta_{36} - \Delta \beta_{37})] \\
S_{\gamma_1}^{E_1} &= \frac{1}{2} [\Delta \gamma_2 - \Delta \gamma_4 + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \gamma_5 + \Delta \gamma_6 - \Delta \gamma_7 - \Delta \gamma_8)] \\
S_{\gamma_2}^{E_1} &= -\frac{1}{2} [\Delta \gamma_1 - \Delta \gamma_3 + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \gamma_5 - \Delta \gamma_6 - \Delta \gamma_7 + \Delta \gamma_8)] \\
S_{\delta_1}^{E_1} &= \frac{1}{2} [\Delta \delta_1 - \Delta \delta_3 + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \delta_5 - \Delta \delta_6 - \Delta \delta_7 + \Delta \delta_8)] \\
S_{\delta_2}^{E_1} &= \frac{1}{2} [\Delta \delta_2 - \Delta \delta_4 + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \delta_5 + \Delta \delta_6 - \Delta \delta_7 - \Delta \delta_8)]
\end{aligned}$$

Tabelle 1 (Fortsetzung)

$E_2$	$S_{x_1}^{E_2} =$	$\frac{1}{2} (\Delta x_1 - \Delta x_2 + \Delta x_3 - \Delta x_4)$
	$S_{x_2}^{E_2} =$	$\frac{1}{2} (\Delta x_5 - \Delta x_6 + \Delta x_7 - \Delta x_8)$
	$S_{y_1}^{E_2} =$	$\frac{1}{2} (\Delta y_1 - \Delta y_2 + \Delta y_3 - \Delta y_4)$
	$S_{y_2}^{E_2} =$	$\frac{1}{2} (\Delta y_5 - \Delta y_6 + \Delta y_7 - \Delta y_8)$
	$S_{\alpha_1}^{E_2} =$	$\frac{1}{2} (\Delta \alpha_{56} - \Delta \alpha_{67} + \Delta \alpha_{78} - \Delta \alpha_{58})$
	$S_{\alpha_2}^{E_2} =$	$\frac{1}{2} (-\Delta \alpha_{12} + \Delta \alpha_{23} - \Delta \alpha_{34} + \Delta \alpha_{14})$
	$S_{\beta_1}^{E_2} =$	$\frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta \beta_{15} - \Delta \beta_{26} + \Delta \beta_{37} - \Delta \beta_{48} + \Delta \beta_{18} - \Delta \beta_{25} + \Delta \beta_{36} - \Delta \beta_{47})$
	$S_{\beta_2}^{E_2} =$	$\frac{1}{\sqrt{8}} (\Delta \beta_{15} - \Delta \beta_{26} + \Delta \beta_{37} - \Delta \beta_{48} - \Delta \beta_{18} + \Delta \beta_{25} - \Delta \beta_{36} + \Delta \beta_{47})$
	$S_{\gamma_1}^{E_2} =$	$\frac{1}{2} (\Delta \gamma_5 - \Delta \gamma_6 + \Delta \gamma_7 - \Delta \gamma_8)$
	$S_{\gamma_2}^{E_2} =$	$\frac{1}{2} (\Delta \gamma_1 - \Delta \gamma_2 + \Delta \gamma_3 - \Delta \gamma_4)$
	$S_{\delta_1}^{E_2} =$	$\frac{1}{2} (\Delta \delta_1 - \Delta \delta_2 + \Delta \delta_3 - \Delta \delta_4)$
	$S_{\delta_2}^{E_2} =$	$\frac{1}{2} (\Delta \delta_5 - \Delta \delta_6 + \Delta \delta_7 - \Delta \delta_8)$
$E_3$	$S_{x_1}^{E_3} =$	$\frac{1}{2} [\Delta x_1 - \Delta x_3 - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta x_5 - \Delta x_6 - \Delta x_7 + \Delta x_8)]$
	$S_{x_2}^{E_3} =$	$\frac{1}{2} [\Delta x_2 - \Delta x_4 - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta x_5 + \Delta x_6 - \Delta x_7 - \Delta x_8)]$
	$S_{y_1}^{E_3} =$	$\frac{1}{2} [\Delta y_1 - \Delta y_3 - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta y_5 - \Delta y_6 - \Delta y_7 + \Delta y_8)]$
	$S_{y_2}^{E_3} =$	$\frac{1}{2} [\Delta y_2 - \Delta y_4 - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta y_5 + \Delta y_6 - \Delta y_7 - \Delta y_8)]$
	$S_{\alpha_1}^{E_3} =$	$\frac{1}{2} [\Delta \alpha_{58} - \Delta \alpha_{67} - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \alpha_{12} - \Delta \alpha_{23} - \Delta \alpha_{34} + \Delta \alpha_{14})]$
	$S_{\alpha_2}^{E_3} =$	$\frac{1}{2} [\Delta \alpha_{56} - \Delta \alpha_{78} - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \alpha_{12} + \Delta \alpha_{23} - \Delta \alpha_{34} - \Delta \alpha_{14})]$
	$S_{\beta_1}^{E_3} =$	$\frac{1}{2\sqrt{2-\sqrt{2}}} [(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}) (\Delta \beta_{15} + \Delta \beta_{18} - \Delta \beta_{36} - \Delta \beta_{37}) - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \beta_{25} - \Delta \beta_{26} - \Delta \beta_{47} + \Delta \beta_{48})]$
	$S_{\beta_2}^{E_3} =$	$\frac{1}{2\sqrt{2-\sqrt{2}}} [(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}) (\Delta \beta_{25} + \Delta \beta_{26} - \Delta \beta_{47} - \Delta \beta_{48}) - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \beta_{15} - \Delta \beta_{18} + \Delta \beta_{36} - \Delta \beta_{37})]$
	$S_{\gamma_1}^{E_3} =$	$\frac{1}{2} [\Delta \gamma_2 - \Delta \gamma_4 - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \gamma_5 + \Delta \gamma_6 - \Delta \gamma_7 - \Delta \gamma_8)]$
	$S_{\gamma_2}^{E_3} =$	$-\frac{1}{2} [\Delta \gamma_1 - \Delta \gamma_3 - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \gamma_5 - \Delta \gamma_6 - \Delta \gamma_7 + \Delta \gamma_8)]$
	$S_{\delta_1}^{E_3} =$	$\frac{1}{2} [\Delta \delta_1 - \Delta \delta_3 - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \delta_5 - \Delta \delta_6 - \Delta \delta_7 + \Delta \delta_8)]$
	$S_{\delta_2}^{E_3} =$	$\frac{1}{2} [\Delta \delta_2 - \Delta \delta_4 - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta \delta_5 + \Delta \delta_6 - \Delta \delta_7 - \Delta \delta_8)]$

Tabelle 2. F-Matricelemente

A <sub>1</sub>	$F_{xx}^{A_1} = f_{xx} + 2f'_{xx} + f''_{xx} + 2f_{xx}^+ + 2f_{xx}^{++}$	$F_{\alpha\alpha}^{A_1} = f_{\alpha\alpha} + 2f'_{\alpha\alpha} + f''_{\alpha\alpha} + 2f_{\alpha\alpha}^+ + 2f_{\alpha\alpha}^{++}$
	$F_{xy}^{A_1} = f_{xy} + 2f'_{xy} + f''_{xy} + 2f_{xy}^+ + 2f_{xy}^{++}$	$-4\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)(f_{\alpha\beta} + f'_{\alpha\beta} + f''_{\alpha\beta} + f_{\alpha\beta}''')$
	$F_{x\alpha}^{A_1} = 2f_{x\alpha} + 2f'_{x\alpha} + f_{x\alpha}'' + 2f_{x\alpha}^{++} + f_{x\alpha}^{+++}$	$+ \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2(f_{\beta\beta} + 2f_{\beta\beta}^+ + 2f_{\beta\beta}'' + 2f_{\beta\beta}''')$
	$-2\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)(f_{x\beta} + f'_{x\beta} + f''_{x\beta} + f_{x\beta}''')$	$F_{\alpha\delta}^{A_1} = 2f_{\alpha\delta} + 2f'_{\alpha\delta} + f_{\alpha\delta}'' + 2f_{\alpha\delta}^+ + 2f_{\alpha\delta}^{++}$
	$F_{x\delta}^{A_1} = f_{x\delta} + 2f'_{x\delta} + f_{x\delta}'' + 2f_{x\delta}^+ + 2f_{x\delta}^{++}$	$-2\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)(f_{\beta\delta} + f'_{\beta\delta} + f_{\beta\delta}'' + f_{\beta\delta}''')$
	$F_{yy}^{A_1} = f_{yy} + 2f'_{yy} + f''_{yy} + 2f_{yy}^+ + 2f_{yy}^{++}$	$F_{\delta\delta}^{A_1} = f_{\delta\delta} + 2f'_{\delta\delta} + f_{\delta\delta}'' + 2f_{\delta\delta}^+ + 2f_{\delta\delta}^{++}$
A <sub>2</sub>	$F_{\gamma\gamma}^{A_2} = f_{\gamma\gamma} + 2f'_{\gamma\gamma} + f''_{\gamma\gamma} + 2f_{\gamma\gamma}^+ + 2f_{\gamma\gamma}^{++}$	
	$F_{\beta\beta}^{B_1} = f_{\beta\beta} + 2f'_{\beta\beta} + f''_{\beta\beta} - 2f_{\beta\beta}^+ - 2f_{\beta\beta}^{++}$	$F_{\gamma\gamma}^{B_1} = f_{\gamma\gamma} + 2f'_{\gamma\gamma} + f''_{\gamma\gamma} - 2f_{\gamma\gamma}^+ - 2f_{\gamma\gamma}^{++}$
B <sub>1</sub>	$F_{\beta\gamma}^{B_1} = 2f_{\beta\gamma} - 2f'_{\beta\gamma} + 2f''_{\beta\gamma} - 2f_{\beta\gamma}^+ - 2f_{\beta\gamma}^{++}$	
	$F_{xx}^{B_2} = f_{xx} + 2f'_{xx} + f''_{xx} - 2f_{xx}^+ - 2f_{xx}^{++}$	$F_{y\alpha}^{B_2} = 2f_{y\alpha} + 2f'_{y\alpha} - f_{y\alpha}'' - 2f_{y\alpha}^+ - f_{y\alpha}^{+++}$
	$F_{xy}^{B_2} = f_{xy} + 2f'_{xy} + f''_{xy} - 2f_{xy}^+ - 2f_{xy}^{++}$	$F_{y\delta}^{B_2} = f_{y\delta} + 2f'_{y\delta} + f''_{y\delta} - 2f_{y\delta}^+ - 2f_{y\delta}^{++}$
	$F_{x\alpha}^{B_2} = 2f_{x\alpha} + 2f'_{x\alpha} - f_{x\alpha}'' - 2f_{x\alpha}^+ - f_{x\alpha}^{+++}$	$F_{\alpha\alpha}^{B_2} = f_{\alpha\alpha} + 2f'_{\alpha\alpha} + f''_{\alpha\alpha} - 2f_{\alpha\alpha}^+ - 2f_{\alpha\alpha}^{++}$
	$F_{x\delta}^{B_2} = f_{x\delta} + 2f'_{x\delta} + f''_{x\delta} - 2f_{x\delta}^+ - 2f_{x\delta}^{++}$	$F_{\alpha\delta}^{B_2} = 2f_{\alpha\delta} + 2f'_{\alpha\delta} - f_{\alpha\delta}'' - 2f_{\alpha\delta}^+ - f_{\alpha\delta}^{+++}$
	$F_{yy}^{B_2} = f_{yy} + 2f'_{yy} + f''_{yy} - 2f_{yy}^+ - 2f_{yy}^{++}$	$F_{\delta\delta}^{B_2} = f_{\delta\delta} + 2f'_{\delta\delta} + f''_{\delta\delta} - 2f_{\delta\delta}^+ - 2f_{\delta\delta}^{++}$
E <sub>1</sub>	$F_{xx}^{E_1} = f_{xx} - f'_{xx} + \sqrt{2}(f_{xx}^+ - f_{xx}^{++})$	$F_{\alpha\beta}^{E_1} = (2 + \sqrt{2})\frac{1}{2}(f_{\alpha\beta} - f_{\alpha\beta}'') + \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) - \frac{1}{2}(f_{\alpha\beta} - f_{\alpha\beta}'')$
	$F_{xy}^{E_1} = f_{xy} - f'_{xy} + \sqrt{2}(f_{xy}^+ - f_{xy}^{++})$	$F_{\alpha\gamma}^{E_1} = -2f_{\alpha\gamma}^{++} - \sqrt{2}(f_{\alpha\gamma} + f_{\alpha\gamma}'')$
	$F_{x\alpha}^{E_1} = f_{x\alpha}^+ - f_{x\alpha}^{+++} + \sqrt{2}(f_{x\alpha} - f_{x\alpha}'')$	$F_{\alpha\delta}^{E_1} = f_{\alpha\delta}^+ - f_{\alpha\delta}^{+++} + \sqrt{2}(f_{\alpha\delta} - f_{\alpha\delta}'')$
	$F_{x\beta}^{E_1} = (2 + \sqrt{2})\frac{1}{2}(f_{x\beta} - f_{x\beta}'') + \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) - \frac{1}{2}(f_{x\beta} - f_{x\beta}'')$	$F_{\beta\beta}^{E_1} = f_{\beta\beta} - f_{\beta\beta}'' + \sqrt{2}(f_{\beta\beta}^+ - f_{\beta\beta}^{++})$
	$F_{x\gamma}^{E_1} = -2f'_{x\gamma} - \sqrt{2}(f_{x\gamma}^+ + f_{x\gamma}^{++})$	$F_{\beta\gamma}^{E_1} = -(2 + \sqrt{2})\frac{1}{2}(f_{\beta\gamma} + f_{\beta\gamma}') - \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) - \frac{1}{2}(f_{\beta\gamma} + f_{\beta\gamma}'')$
	$F_{x\delta}^{E_1} = f_{x\delta} - f'_{x\delta} + \sqrt{2}(f_{x\delta}^+ - f_{x\delta}^{++})$	$F_{\beta\delta}^{E_1} = (2 + \sqrt{2})\frac{1}{2}(f_{\beta\delta} - f_{\beta\delta}'') + \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) - \frac{1}{2}(f_{\beta\delta} - f_{\beta\delta}'')$
	$F_{yy}^{E_1} = f_{yy} - f'_{yy} + \sqrt{2}(f_{yy}^+ - f_{yy}^{++})$	$F_{\gamma\gamma}^{E_1} = f_{\gamma\gamma} - f'_{\gamma\gamma} + \sqrt{2}(f_{\gamma\gamma}^+ - f_{\gamma\gamma}^{++})$
	$F_{y\alpha}^{E_1} = f_{y\alpha}^+ - f_{y\alpha}^{+++} + \sqrt{2}(f_{y\alpha} - f_{y\alpha}'')$	$F_{\gamma\delta}^{E_1} = -2f_{\gamma\delta} - \sqrt{2}(f_{\gamma\delta}^+ + f_{\gamma\delta}^{++})$
	$F_{y\beta}^{E_1} = (2 + \sqrt{2})\frac{1}{2}(f_{y\beta} - f_{y\beta}'') + \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) - \frac{1}{2}(f_{y\beta} - f_{y\beta}'')$	$F_{\delta\delta}^{E_1} = f_{\delta\delta} - f_{\delta\delta}'' + \sqrt{2}(f_{\delta\delta}^+ - f_{\delta\delta}^{++})$
	$F_{y\gamma}^{E_1} = -2f'_{y\gamma} - \sqrt{2}(f_{y\gamma}^+ + f_{y\gamma}^{++})$	$F_{\alpha\alpha}^{E_2} = f_{\alpha\alpha} - 2f'_{\alpha\alpha} + f''_{\alpha\alpha}$
	$F_{y\delta}^{E_1} = f_{y\delta} - f'_{y\delta} + \sqrt{2}(f_{y\delta}^+ - f_{y\delta}^{++})$	$F_{\alpha\beta}^{E_2} = \sqrt{2}(-f_{\alpha\beta} + f'_{\alpha\beta} + f''_{\alpha\beta} - f_{\alpha\beta}''')$
	$F_{\alpha\alpha}^{E_1} = f_{\alpha\alpha} - f'_{\alpha\alpha} + \sqrt{2}(f_{\alpha\alpha}^+ - f_{\alpha\alpha}^{++})$	$F_{\alpha\gamma}^{E_2} = 2f_{\alpha\gamma} - 2f'_{\alpha\gamma} - f_{\alpha\gamma}'' - f_{\alpha\gamma}^{+++}$
E <sub>2</sub>	$F_{xx}^{E_2} = f_{xx} - 2f'_{xx} + f''_{xx}$	$F_{\alpha\delta}^{E_2} = -f_{\alpha\delta}'' + 2f_{\alpha\delta}^{++} - f_{\alpha\delta}^{+++}$
	$F_{xy}^{E_2} = f_{xy} - 2f'_{xy} + f''_{xy}$	$F_{\beta\beta}^{E_2} = f_{\beta\beta} - 2f_{\beta\beta}'' + f_{\beta\beta}'''$
	$F_{x\alpha}^{E_2} = -f_{x\alpha}'' + 2f_{x\alpha}^{++} - f_{x\alpha}^{+++}$	$F_{\beta\gamma}^{E_2} = \sqrt{2}(-f_{\beta\gamma} - f'_{\beta\gamma} + f_{\beta\gamma}'' + f_{\beta\gamma}''')$
	$F_{x\beta}^{E_2} = \sqrt{2}(f_{x\beta} - f'_{x\beta} - f_{x\beta}'' + f_{x\beta}''')$	$F_{\beta\delta}^{E_2} = \sqrt{2}(f_{\beta\delta} - f'_{\beta\delta} - f_{\beta\delta}'' + f_{\beta\delta}''')$
	$F_{x\gamma}^{E_2} = -2f'_{x\gamma} + 2f_{x\gamma}''$	$F_{\gamma\gamma}^{E_2} = f_{\gamma\gamma} - 2f'_{\gamma\gamma} + f_{\gamma\gamma}''$
	$F_{x\delta}^{E_2} = f_{x\delta} - 2f'_{x\delta} + f_{x\delta}''$	$F_{\gamma\delta}^{E_2} = -2f_{\gamma\delta}^+ + 2f_{\gamma\delta}^{++}$
	$F_{yy}^{E_2} = f_{yy} - 2f'_{yy} + f_{yy}''$	$F_{\delta\delta}^{E_2} = f_{\delta\delta} - 2f_{\delta\delta}'' + f_{\delta\delta}'''$
	$F_{y\alpha}^{E_2} = -f_{y\alpha}'' + 2f_{y\alpha}^{++} - f_{y\alpha}^{+++}$	
	$F_{y\beta}^{E_2} = \sqrt{2}(f_{y\beta} - f'_{y\beta} - f_{y\beta}'' + f_{y\beta}''')$	
	$F_{y\gamma}^{E_2} = -2f_{y\gamma}^+ + 2f_{y\gamma}^{++}$	
	$F_{y\delta}^{E_2} = f_{y\delta} - 2f'_{y\delta} + f_{y\delta}''$	

$$\begin{aligned}
 E_3 \quad F_{xx}^{E_3} &= f_{xx} - f''_{xx} - \sqrt{2} (f_{xx}^+ - f_{xx}^{++}) & + \sqrt{2} (f_{\alpha\beta} - f''_{\alpha\beta}) - \\
 F_{xy}^{E_3} &= f_{xy} - f''_{xy} - \sqrt{2} (f_{xy}^+ - f_{xy}^{++}) & - (2 + \sqrt{2})(f_{\alpha\beta} - f''_{\alpha\beta}) + \\
 F_{\alpha\alpha}^{E_3} &= f_{\alpha\alpha}^+ - f_{\alpha\alpha}^{++} - \sqrt{2} (f_{\alpha\alpha} - f'_{\alpha\alpha}) + & + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) [f_{\beta\beta} - f'_{\beta\beta} - \\
 & + \frac{1}{2} \sqrt{2} (f_{x\beta} - f''_{x\beta}) - & - \sqrt{2} (f_{\beta\beta}^+ - f_{\beta\beta}^{++})] \\
 & - \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) (f'_{x\beta} - f''_{x\beta}) & F_{\alpha\gamma}^{E_3} = -2 f_{\alpha\gamma}^{++} + \sqrt{2} (f_{\alpha\gamma} + f'_{\alpha\gamma}) - \\
 & & - \frac{1}{2} \sqrt{2} (f'_{\beta\gamma} + f''_{\beta\gamma}) + \\
 F_{xy}^{E_3} &= -2 f'_{xy} + \sqrt{2} (f_{xy}^+ + f_{xy}^{++}) & + \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) (f_{\beta\gamma} + f''_{\beta\gamma}) \\
 F_{x\delta}^{E_3} &= f_{x\delta} - f''_{x\delta} - \sqrt{2} (f_{x\delta}^+ - f_{x\delta}^{++}) & F_{\alpha\delta}^{E_3} = f_{\alpha\delta}^+ - f_{\alpha\delta}^{++} - \sqrt{2} (f_{\alpha\delta} - f'_{\alpha\delta}) + \\
 F_{yy}^{E_3} &= f_{yy} - f''_{yy} - \sqrt{2} (f_{yy}^+ - f_{yy}^{++}) & + \frac{1}{2} \sqrt{2} (f_{\beta\delta} - f''_{\beta\delta}) - \\
 F_{y\alpha}^{E_3} &= f_{y\alpha}^+ - f_{y\alpha}^{++} - \sqrt{2} (f_{y\alpha} - f'_{y\alpha}) + & - \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) (f'_{\beta\delta} - f''_{\beta\delta}) \\
 & + \frac{1}{2} \sqrt{2} (f_{y\beta} - f''_{y\beta}) - & \\
 & - \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) (f'_{y\beta} - f''_{y\beta}) & \\
 F_{yy}^{E_3} &= -2 f''_{yy} + \sqrt{2} (f_{yy}^+ + f_{yy}^{++}) & F_{\gamma\gamma}^{E_3} = f_{\gamma\gamma} - f''_{\gamma\gamma} - \sqrt{2} (f_{\gamma\gamma}^+ - f_{\gamma\gamma}^{++}) \\
 F_{y\delta}^{E_3} &= f_{y\delta} - f''_{y\delta} - \sqrt{2} (f_{y\delta}^+ - f_{y\delta}^{++}) & F_{\gamma\delta}^{E_3} = -2 f_{\gamma\delta} + \sqrt{2} (f_{\gamma\delta}^+ + f_{\gamma\delta}^{++}) \\
 F_{\alpha\alpha}^{E_3} &= f_{\alpha\alpha} - f''_{\alpha\alpha} - \sqrt{2} (f_{\alpha\alpha}^+ - f_{\alpha\alpha}^{++}) + & F_{\delta\delta}^{E_3} = f_{\delta\delta} - f''_{\delta\delta} - \sqrt{2} (f_{\delta\delta}^+ - f_{\delta\delta}^{++})
 \end{aligned}$$

Die Hauptkraftkonstanten  $f_{tt}$  sind die reinen zweiten Ableitungen der Potentialfunktion  $V$  nach den inneren Koordinaten

$$f_{xx} = \frac{\partial^2 V}{\partial x_i^2}, f_{\alpha\alpha} = \frac{\partial^2 V}{\partial \alpha_i^2}$$

usw.

Entsprechend sind die Wechselwirkungskonstanten  $f_{st}$  ( $s \neq t$ ) sowie  $f'_{st}, f''_{st}, f'''_{st}, f_{st}^+, f_{st}^{++}, f_{st}^{+++}$  ( $s = t$  oder  $s \neq t$ ) die gemischten zweiten Ableitungen.

Alle ungestrichenen Konstanten  $f_{st}$  gehören zu Koordinatenpaaren mit einem gemeinsamen Index  $i$ ; so ist z. B.:

$$f_{xy} = \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial y_i}; f_{x\alpha} = \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial \alpha_{ik}}; f_{x\beta} = \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial \beta_{il}}.$$

Im Falle der doppelt indizierten Koordinaten  $\Delta\alpha_{ik}$  und  $\Delta\beta_{il}$  können zwei symmetrisch nicht äquivalente Paare  $\Delta\alpha_{ik} \Delta\beta_{il}$  mit gemeinsamen Index  $i$  gebildet werden. Geometrisch bedeutet diese Tatsache, daß im archimedischen Antiprisma die Ebenen, in denen die Winkel  $\alpha_{ik}$  und  $\beta_{il}$  gemessen werden, genau zwei verschiedene Winkel bilden können. Aus diesem Grunde gehören zu den beiden Typen von Koordinatenpaaren auch verschiedene Kraftkonstanten. Die ungestrichene Konstante  $f_{\alpha\beta}$  gehört dabei zu dem Paar, dessen Ebenen den kleineren Winkel einschließen. Die andere Konstante wird mit  $f'_{\alpha\beta}$  bezeichnet. Zum Beispiel ist

$$f_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 V}{\partial \alpha_{14} \partial \beta_{13}} \text{ und } f'_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 V}{\partial \alpha_{14} \partial \beta_{15}}.$$

Die weiteren Wechselwirkungskonstanten werden nach der relativen Lage der beteiligten Koordinaten unterschieden. Bei den Koordinaten  $\Delta x_i, \Delta y_i, \Delta \alpha_{ik}, \Delta \gamma_i, \Delta \delta_i$  bedeuten gestrichene Kraftkonstanten, daß die beiden beteiligten Koordinaten derselben Quadratfläche zugeordnet sind. Die Kraftkonstanten mit Kreuzen  $f_{st}^+, f_{st}^{++}, f_{st}^{+++}$ , die sich auf die genannten fünf Koordinaten beziehen, werden mit jeweils zwei Koordinaten gebildet, die verschiedenen Quadraten zugeordnet sind.

Tabelle 3. G-Matrixelemente

$$\begin{array}{l}
 A_1 \quad G_{xx}^{A_1} = \mu_C \qquad G_{yy}^{A_1} = \mu_C + \mu_N \\
 \qquad G_{xy}^{A_1} = -\mu_C \qquad G_{y\alpha}^{A_1} = 0 \\
 \qquad G_{x\alpha}^{A_1} = 0 \qquad G_{y\delta}^{A_1} = 0 \\
 \qquad G_{x\delta}^{A_1} = 0 \qquad G_{\alpha\alpha}^{A_1} = \frac{2 \varrho^2 \mu_C}{1 + \sqrt{2}} \\
 \qquad \qquad \qquad G_{\delta\delta}^{A_1} = \mu_C (\varrho + \eta)^2 + \mu_N \eta^2 \\
 \\
 A_2 \quad G_{\gamma\gamma}^{A_2} = \mu_C (\varrho + \eta)^2 + \mu_N \eta^2 \\
 B_1 \quad G_{\beta\beta}^{B_1} = \frac{1 + 2\sqrt{2}}{1 + \sqrt{2}} \varrho^2 \mu_C \quad G_{\beta\gamma}^{B_1} = \sqrt{\frac{1 + 2\sqrt{2}}{1 + \sqrt{2}}} \varrho (\varrho + \eta) \mu_C \\
 \qquad G_{\gamma\gamma}^{B_1} = (\varrho + \eta)^2 \mu_C + \eta^2 \mu_N \\
 B_2 \quad G_{xx}^{B_2} = \mu_C + \frac{8 \mu_{M0}}{1 + 2\sqrt{2}} \qquad G_{yy}^{B_2} = \mu_C + \mu_N \\
 \qquad G_{xy}^{B_2} = -\mu_C \qquad G_{y\alpha}^{B_2} = 0 \\
 \qquad G_{x\alpha}^{B_2} = -\frac{16 \sqrt{2} \varrho \mu_{M0}}{(1 + 2\sqrt{2}) \sqrt{2 + \sqrt{2}}} \qquad G_{y\delta}^{B_2} = 0 \\
 \qquad G_{x\delta}^{B_2} = \frac{8 \sqrt{8} \varrho \mu_{M0}}{1 + 2\sqrt{2}} \\
 \qquad G_{\alpha\alpha}^{B_2} = \frac{2 \varrho^2 \mu_C}{1 + \sqrt{2}} + \frac{64 \varrho^2 \mu_{M0}}{(1 + 2\sqrt{2})(2 + \sqrt{2})} \\
 \qquad G_{\alpha\delta}^{B_2} = -\frac{\sqrt{2} \mu_C}{\sqrt{1 + \sqrt{2}}} \varrho (\varrho + \eta) - \frac{32 \varrho^2 \mu_{M0}}{(1 + 2\sqrt{2}) \sqrt{1 + \sqrt{2}}} \\
 \qquad G_{\delta\delta}^{B_2} = (\varrho + \eta)^2 \mu_C + \eta^2 \mu_N + \frac{16 \sqrt{2} \varrho^2}{1 + 2\sqrt{2}} \mu_{M0} \\
 \\
 E_1 \quad G_{xx}^{E_1} = \mu_C + \frac{8 \sqrt{2} \mu_{M0}}{1 + 2\sqrt{2}} \qquad G_{y\alpha}^{E_1} = 0 \\
 \qquad G_{xy}^{E_1} = -\mu_C \qquad G_{y\beta}^{E_1} = 0 \\
 \qquad G_{x\alpha}^{E_1} = -\frac{16 \sqrt{2} \varrho \mu_{M0}}{(1 + 2\sqrt{2}) \sqrt{2 + \sqrt{2}}} \qquad G_{y\gamma}^{E_1} = 0 \\
 \qquad G_{x\beta}^{E_1} = -\frac{16 \varrho \mu_{M0}}{1 + 2\sqrt{2}} \qquad G_{y\delta}^{E_1} = 0 \\
 \qquad G_{x\gamma}^{E_1} = \frac{8 \varrho \mu_{M0}}{\sqrt{4 + \sqrt{2}}} \qquad G_{\alpha\alpha}^{E_1} = 2 \varrho^2 \mu_C + \frac{32 \varrho^2 \mu_{M0}}{(1 + 2\sqrt{2})(1 + \sqrt{2})} \\
 \qquad G_{x\delta}^{E_1} = -\frac{4 \sqrt{8} \varrho \mu_{M0}}{1 + 2\sqrt{2}} \qquad G_{\alpha\beta}^{E_1} = -\frac{2 \varrho^2 \mu_C}{(2 + \sqrt{2})^{3/2}} + \frac{32 \varrho^2 \mu_{M0}}{(1 + 2\sqrt{2}) \sqrt{2 + \sqrt{2}}} \\
 \qquad G_{yy}^{E_1} = \mu_C + \mu_N \qquad G_{\alpha\gamma}^{E_1} = -\sqrt{\frac{1 + 2\sqrt{2}}{1 + \sqrt{2}}} \varrho (\varrho + \eta) \mu_C \\
 \qquad G_{\alpha\delta}^{E_1} = -\frac{\varrho (\varrho + \eta)}{\sqrt{1 + \sqrt{2}}} \mu_C + \frac{8 \sqrt{2} \varrho^2 \mu_{M0}}{(1 + 2\sqrt{2}) \sqrt{1 + \sqrt{2}}} \\
 \qquad G_{\beta\beta}^{E_1} = \frac{5 + 2\sqrt{2}}{2 + \sqrt{2}} \varrho^2 \mu_C + \frac{16 \sqrt{2} \varrho^2}{1 + 2\sqrt{2}} \mu_{M0} \\
 \qquad G_{\beta\gamma}^{E_1} = -\frac{\sqrt{4 + \sqrt{2}}}{2 + 2\sqrt{2}} \varrho (\varrho + \eta) \mu_C - \frac{8 \sqrt{2} \varrho^2}{\sqrt{4 + \sqrt{2}}} \mu_{M0} \\
 \qquad G_{\beta\delta}^{E_1} = \frac{\sqrt{2}}{2} (1 + \sqrt{2}) \varrho (\varrho + \eta) \mu_C + \frac{8 \sqrt{2} \varrho^2}{1 + 2\sqrt{2}} \mu_{M0} \\
 \qquad G_{\gamma\gamma}^{E_1} = \eta^2 \mu_N + (\varrho + \eta)^2 \mu_C + 4 \varrho^2 \mu_{M0} \\
 \qquad G_{\gamma\delta}^{E_1} = -\frac{4 \varrho^2 \mu_{M0}}{\sqrt{1 + 2\sqrt{2}}} \\
 \qquad G_{\delta\delta}^{E_1} = \eta^2 \mu_N + (\varrho + \eta)^2 \mu_C + \frac{4 \varrho^2 \mu_{M0}}{1 + 2\sqrt{2}}
 \end{array}$$

Tabelle 3 (Fortsetzung)

$E_2$	$G_{xx}^{E_2} = \mu_C$	$G_{y\alpha}^{E_2} = 0$	$G_{\alpha\delta}^{E_2} = 0$
	$G_{xy}^{E_2} = -\mu_C$	$G_{y\beta}^{E_2} = 0$	$G_{\beta\beta}^{E_2} = 2 \varrho^2 \mu_C$
	$G_{x\alpha}^{E_2} = 0$	$G_{y\gamma}^{E_2} = 0$	$G_{\beta\gamma}^{E_2} = -\sqrt{\frac{1+2\sqrt{2}}{2+2\sqrt{2}}} \varrho (\varrho + \eta) \mu_C$
	$G_{x\beta}^{E_2} = 0$	$G_{y\delta}^{E_2} = 0$	$G_{\beta\delta}^{E_2} = \sqrt{\frac{1+2\sqrt{2}}{2}} (1 + \sqrt{2}) \varrho (\varrho + \eta) \mu_C$
	$G_{x\gamma}^{E_2} = 0$	$G_{\alpha\alpha}^{E_2} = \frac{2(1+2\sqrt{2})}{1+\sqrt{2}} \varrho^2 \mu_C$	$G_{\gamma\gamma}^{E_2} = \eta^2 \mu_N + (\varrho + \eta)^2 \mu_C$
	$G_{x\delta}^{E_2} = 0$	$G_{\alpha\beta}^{E_2} = -\frac{4+\sqrt{2}}{1+\sqrt{2}} \varrho^2 \mu_C$	$G_{\gamma\delta}^{E_2} = 0$
	$G_{yy}^{E_2} = \mu_C + \mu_N$	$G_{\alpha\gamma}^{E_2} = \sqrt{\frac{2(1+2\sqrt{2})}{1+\sqrt{2}}} \varrho (\varrho + \eta) \mu_C$	$G_{\delta\delta}^{E_2} = \eta^2 \mu_N + (\varrho + \eta)^2 \mu_C$
$E_3$	$G_{xx}^{E_3} = \mu_C$	$G_{y\alpha}^{E_3} = 0$	$G_{\alpha\delta}^{E_3} = \frac{\varrho (\varrho + \eta)}{\sqrt{1+\sqrt{2}}} \mu_C$
	$G_{xy}^{E_3} = -\mu_C$	$G_{y\beta}^{E_3} = 0$	$G_{\gamma\gamma}^{E_3} = \eta^2 \mu_N + (\varrho + \eta)^2 \mu_C$
	$G_{x\alpha}^{E_3} = 0$	$G_{y\gamma}^{E_3} = 0$	$G_{\gamma\delta}^{E_3} = 0$
	$G_{x\beta}^{E_3} = 0$	$G_{y\delta}^{E_3} = 0$	
	$G_{x\delta}^{E_3} = 0$	$G_{\alpha\alpha}^{E_3} = 2 \varrho^2 \mu_C$	
	$G_{yy}^{E_3} = \mu_C + \mu_N$	$G_{\alpha\gamma}^{E_3} = \sqrt{\frac{1+2\sqrt{2}}{1+\sqrt{2}}} \varrho (\varrho + \eta) \mu_C$	$G_{\delta\delta}^{E_3} = \eta^2 \mu_N + (\varrho + \eta)^2 \mu_C$

Die zu den Koordinaten  $\Delta\beta_{il}$  gehörenden Kraftkonstanten  $f'_{\beta\beta}$ ,  $f''_{\beta\beta}$ ,  $f^+_{\beta\beta}$ ,  $f^{++}_{\beta\beta}$  werden nach der Richtung der beteiligten Winkel unterschieden. Zu den gestrichenen Konstanten gehören jeweils zwei Winkel, die durch eine Drehung um die vierzählige Achse ineinander übergeführt werden, zu den Konstanten  $f^+_{\beta\beta}$  und  $f^{++}_{\beta\beta}$  die übrigen Paare  $\Delta\beta_{il}$   $\Delta\beta_{jm}$ .

Bei den Paaren, die aus einer Koordinate  $\Delta\beta_{il}$  und einer der übrigen Koordinaten bestehen, ist weder eine Unterscheidung nach der Richtung der Winkel  $\beta_{il}$  noch nach der Zugehörigkeit zu einer der beiden Quadratflächen möglich. In diesem Fall treten nur gestrichene Konstanten auf.

Die Anzahl der Striche oder Kreuze richtet sich nach dem Abstand der beteiligten Koordinaten. Konstanten mit einem Strich oder Kreuz stehen in der Potentialfunktion bei benachbarten Paaren, jene mit zwei Strichen oder Kreuzen bei Paaren übernächster Nachbarn und die mit drei Strichen oder Kreuzen gehören zu Paaren gegenüberliegender Koordinaten.

### G-Matrix

Die Elemente der G-Matrix wurden nach der Methode von WILSON [8, 9] und der für lineare Moleküle (lineare Mo — C — N-Ketten) gültigen Erweiterung von FERIGLE und MEISTER [1] berechnet.

In der Tab. 3 bedeuten:

- $\varrho$  den reziproken Abstand Mo — C,
- $\eta$  den reziproken Abstand C — N,
- $\mu_\alpha$  die reziproke Masse des Atoms  $\alpha$ .

Wir danken Herrn Dr. G. GLEMMANN für wertvolle Diskussionen.

### Literatur

- [1] FERIGLE, S. M., and A. G. MEISTER: J. chem. Physics **19**, 982 (1951).
- [2] GLIEMANN, G.: Theoret. chim. Acta **1**, 14 (1962).
- [3] HOARD, J. L., and H. H. NORDSIECK: J. Amer. chem. Soc. **61**, 2853 (1939).
- [4] —, and J. V. SILVERTON: Proc. 7<sup>th</sup> ICCU Stockholm-Uppsala, 1962.
- [5] KÖNIG, E.: Theoret. chim. Acta **1**, 23 (1962).
- [6] SALVETTI, O.: Ann. di Chim. **48**, 1293 (1958).
- [7] STAMMREICH, H., u. O. SALA: Z. Elektrochem. **64**, 741 (1960); **65**, 149 (1961).
- [8] WILSON jr., E. B.: J. chem. Physics **7**, 1047 (1939); **9**, 76 (1941).
- [9] —, J. C. DECUS and P. C. CROSS: Molecular Vibrations, McGraw-Hill, New York 1955.

*(Eingegangen am 12. Juni 1963)*