

Zeitschrift: Schweizerische mineralogische und petrographische Mitteilungen =
Bulletin suisse de minéralogie et pétrographie

Band: 33 (1953)

Heft: 1

Artikel: Beziehungen zwischen der Symmetrie des Kristall-, Fourier- und
Patterson-Raumes. III, Die Harker-Maxima in den tetragonalen
Raumgruppen

Autor: Nowacki, Werner

DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-26448>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

Download PDF: 05.04.2026

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Beziehungen zwischen der Symmetrie des Kristall-, Fourier- und Patterson-Raumes

III. Die Harker-Maxima in den tetragonalen Raumgruppen *)

Von *Werner Nowacki* (Bern)

In der Arbeit (I) dieser Serie¹⁾ wurden die allgemeinen Beziehungen zwischen der Symmetrie des Kristall-, Fourier- und Patterson-Raumes entwickelt, wie sie zuerst bei der Abfassung einer Monographie²⁾ untersucht wurden; in (II) folgte eine Zusammenstellung der Harker-Maxima der triklinen, monoklinen und orthorhombischen Raumgruppen, während in dieser Arbeit (III) diejenigen der tetragonalen Raumgruppen gegeben werden; die nächste Arbeit (IV) wird sich mit den „allgemeinen Auslöschungseinheiten“ befassen, einem Problem, das schon in der zitierten Monographie²⁾ (S. 163/64) erwähnt worden ist.

Als Raumgruppen von Pattersonräumen (\equiv Vektorräumen) treten, wie in (I) gezeigt wurde, nur die 24 zentrosymmetrischen symmorphen Raumgruppen auf; im tetragonalen Fall also $C_{4h}^1 - P4/m$, $C_{4h}^5 - I4/m$, $D_{4h}^1 - P4/mmm$ und $D_{4h}^{17} - I4/mmm$. In der Tabelle 1 sind diese Raumgruppen durch eine Umrahmung gekennzeichnet. Sämtliche Harker-Maxima einer Raumgruppe erhält man durch Differenzenbildung gleichwertiger Koordinatentripel, wofür Tabelle 2 ein Beispiel ($C_{4h}^4 - P4_2/n$) liefert. Die Diagonalglieder liefern das Maximum am Nullpunkt (mit dem Gewicht 8), das in Tabelle 1 stets fortgelassen worden ist. Die Koordinatentripel rechts oberhalb der Diagonale sind zu denen links unten zentrosymmetrisch. Die Gesamtheit aller Koordinatentripel zer-

*) Mitteilung Nr. 59, Abt. für Kristallographie und Strukturlehre, Mineralogisches Institut, Universität Bern.

¹⁾ I = Schweiz. Min. Petr. Mitt. **30** (1950) 147—160; II = *ibid.* 304—310; IV = Allgemeine Auslöschungseinheiten *ibid.* **32** (1952) 185—212.

²⁾ W. NOWACKI, *Fouriersynthese von Kristallen und ihre Anwendung in der Chemie*. Birkhäuser, Basel, **1952**, S. 162—177.

fällt in solche, die unter sich in bezug auf die Raumgruppe des Patterson-raumes ($= C_{4h}^1 - P4/m$) gleichwertig sind:

$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2z$ = Punktlage (Gitterkomplex) $(2h)$ in $C_{4h}^1 - P4/m$;
jeder Harkerpunkt $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \pm 2z)$ tritt aber viermal auf, was das Gewicht vier ergibt; in Tabelle 1 sind die Gewichte, durch einen Schrägstrich von den Koordinaten getrennt, angegeben worden.

$2x, 2y, 0; \overline{2x}, \overline{2y}, 0; \overline{2y}, 2x, 0; 2y, \overline{2x}, 0$ = Punktlage $(4j)$ in $C_{4h}^1 - P4/m$;
Gewicht = 2.

$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y - x, \frac{1}{2}; \frac{1}{2} - x - y, \frac{1}{2} - y + x, \frac{1}{2}; \frac{1}{2} - y + x, \frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2}; \frac{1}{2} + y - x, \frac{1}{2} - x - y, \frac{1}{2}$ = Punktlage $(4k)$ in $C_{4h}^1 - P4/m$; Gewicht = 4.

$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z$ = Punktlage $(8l)$ in $C_{4h}^1 - P4/m$; Gewicht = 1.

$x + y, y - x, 2z$ = Punktlage $(8l)$ in $C_{4h}^1 - P4/m$; Gewicht = 2.

Die Harker-Maxima der Raumgruppe $C_{4h}^4 - P4_2/n$ befinden sich demnach in den Punktlagen $(2h)$, $(4j)$, $(4k)$ und $(8l)$ der Raumgruppe $C_{4h}^1 - P4/m$ mit den in der Tabelle 1 aufgeführten Koordinaten und Gewichten.

Als zweites Beispiel sei noch die innenzentrierte Raumgruppe $S_4^2 - I\bar{4}$, deren Pattersonraum die Symmetrie $C_{4h}^5 - I4/m$ hat, besprochen. Tabelle 3 gibt das Differenzenschema. Wegen der Innenzentrierung erhält das Maximum am Nullpunkt jetzt das Gewicht 8; ausserdem tritt ein zweites solches Maximum im Punkte $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ auf. Diese beiden Maxima sind in Tabelle 1 nicht aufgeführt worden. Die Gesamtheit aller Harker-Maxima der Raumgruppe $S_4^2 - I\bar{4}$ in der Raumgruppe $C_{4h}^5 - I4/m$ zerfällt in die Maxima $2x, 2y, 0$ = innenzentrierte Punktlage $(8h)$ mit dem Gewicht 2 und $x - y, x + y, 2z$ = innenzentrierte Punktlage $(16i)$ mit dem Gewicht 2.

Auf diese Weise wurde die Tabelle 1 berechnet. Von den enantiomorphen Paaren abgesehen gestatten die Harker-Maxima eine eindeutige Raumgruppenbestimmung.

Eingegangen: 9. Februar 1952.

Tabelle 1. Die Harker-Maxima der tetragonalen Raumgruppen

$C_{4h}^1 - P4/m$	2g	2h	4j	4k	8l
$S_4^1 - P\bar{4}$	—	—	2x, 2y, 0/1	—	x-y, y+x, 2z/1
$C_4^1 - P4$	—	—	2x, 2y, 0/1; x-y, x+y, 0/2	—	—
$C_4^2 - P4_1$	—	—	—	2x, 2y, 1/1	x+y, y-x, 3/1
$C_4^4 - P4_3$	—	—	—	2x, 2y, 1/1	x+y, y-x, 1/1
$C_4^3 - P4_2$	—	—	2x, 2y, 0/1	x+y, y-x, 1/2	—
$C_{4h}^1 - P4/m$	0, 0, 2z/4	—	2x, 2y, 0/2; x+y, y-x, 0/4	—	2x, 2y, 2z/1;
$C_{4h}^2 - P4_2/m$	0, 0, 2z/4	—	2x, 2y, 0/2	x+y, y-x, 1/4	x+y, y-x, 2z/2
$C_{4h}^3 - P4/n$	—	1/2, 1/2, 2z/4	2x, 2y, 0/2; 1/2+x+y, 1/2-x+y, 0/4	—	2x, 2y, 2z/1; x+y, y-x, 1/2-2z/2
$C_{4h}^4 - P4_2/n$	—	1/2, 1/2, 1/2+2z/4	2x, 2y, 0/2	1/2+x+y, 1/2+y-x, 1/4	1/2-2x, 1/2-2y, 2z/1; x+y, y-x, 2z/2; x+y, y-x, 2z/2; 1/2-2x, 1/2-2y, 1/2+2z/1
$C_{4h}^5 - I4/m$	4e	8g	8h	16i	
$S_4^2 - I\bar{4}$	—	—	2x, 2y, 0/2	—	x-y, y+x, 2z/2
$C_4^6 - I4$	—	—	2x, 2y, 0/2; x-y, x+y, 0/4	—	—
$C_4^4 - I4_1$	—	—	2x, 2y, 0/2	x-y, y-x, 2z/4	x+y, 1/2+y-x, 3/2
$C_{4h}^5 - I4/m$	0, 0, 2z/8	—	2x, 2y, 0/4 x+y, y-x, 0/8	—	2x, 2y, 2z/2;
$C_{4h}^6 - I4_1/a$	—	0, 1/2, 1/2+2z/4	2x, 2y, 0/4	—	x+y, y-x, 2z/4 x+y, 1/2-x+y, 3/4; 2x, 1/2+2y, 3/2+2z/2; x+y, y-x, 2z/4

Tabelle 1 (1. Fortsetzung)

$D_{4k}^1 - P4/mmm$	2g	2h	4j	4k	4l	4m	4n	4o	8p	8q	8r	8s	8t	16u
$D_{3d}^1 - P\bar{4}2m$	—	—	$x+y, y+x, 0/2;$ $y-x, y-x, 0/2$	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	—	$2x, 0, 2z/1;$ $2y, 0, 2z/1$	—	$x+y, y-x, 2z/1$
$D_{3d}^2 - P\bar{4}2c$	—	—	$x+y, y+x, 1/2;$ $x-y, x-y, 1/2$	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	—	$2x, 0, 1/2 + 2z/1;$ $0, 2y, 1/2 + 2z/1$	—	$x+y, y-x, 2z/1$
$D_{3d}^3 - P\bar{4}2_1m$	—	—	$1/2 + x+y, 1/2 + y+x, 0/2;$ $1/2 + x-y, 1/2 - x+y, 0/2$	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	—	—	$1/2 + 2x, 1/2, 2z/1;$ $1/2 + 2y, 1/2, 2z/1$	$x+y, y-x, 2z/1$
$D_{3d}^4 - P\bar{4}2_1c$	—	—	—	$1/2 + x+y, 1/2 + y+x, 1/2;$ $1/2 + x-y, 1/2 + x-y, 1/2$	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	—	—	$1/2 + 2x, 1/2, 1/2 + 2z/1;$ $1/2 + 2y, 1/2, 1/2 - 2z/1$	$x+y, y-x, 2z/1$
$D_{3d}^5 - P\bar{4}m2$	—	—	—	—	$2x, 0, 0/2;$ $2y, 0, 0/2$	—	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	$x+y, y+x, 2z/1;$ $x-y, y-x, 2z/1$	—	—	$x+y, y-x, 2z/1$
$D_{3d}^6 - P\bar{4}c2$	—	—	—	—	—	$2x, 0, 1/2;$ $2y, 0, 1/2$	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	$x+y, y+x, 1/2 + 2z/1;$ $x-y, x-y, 1/2 + 2z/1$	—	—	$x+y, x-y, 2z/1$
$D_{3d}^7 - P\bar{4}b2$	—	—	—	—	—	—	$1/2 + 2x, 1/2, 0/2;$ $1/2 + 2y, 1/2, 0/2$	—	$2x, 2y, 0/1$	—	$1/2 + x+y, 1/2 + y+x, 2z/1;$ $x-y, x-y, 1/2 + 2z/1$	—	—	$x+y, x-y, 2z/1$
$D_{3d}^8 - P\bar{4}n2$	—	—	—	—	—	—	—	$1/2 + 2x, 1/2, 1/2;$ $1/2 + 2y, 1/2, 1/2$	$2x, 2y, 0/1$	—	$1/2 + x+y, 1/2 + x-y, 2z/1;$ $1/2 + x-y, 1/2 - x-y, 1/2 + 2z/1$	—	—	$x+y, x-y, 2z/1$
$C_{4v}^1 - P4mm$	—	—	$x+y, y+x, 0/2;$ $x-y, x-y, 0/2$	—	$2x, 0, 0/2;$ $2y, 0, 0/2$	—	—	—	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 0/2$	—	—	—	—	—
$C_{4v}^2 - P4bm$	—	—	$1/2 + x+y, 1/2 + y+x, 0/2;$ $1/2 + x-y, 1/2 + x-y, 0/2$	—	—	—	$1/2 + 2x, 1/2, 0/2;$ $1/2 + 2y, 1/2, 0/2$	—	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 0/2$	—	—	—	—	—
$C_{4v}^3 - P4cm$	—	—	$x+y, y+x, 0/2;$ $x-y, x-y, 0/2$	—	—	$2x, 0, 1/2;$ $2y, 0, 1/2$	—	—	$2x, 2y, 0/1$	$x+y, x-y, 1/2$	—	—	—	—
$C_{4v}^4 - P4nm$	—	—	$x+y, y+x, 0/2;$ $x-y, x-y, 0/2$	—	—	—	—	$1/2 + 2x, 1/2, 1/2;$ $1/2 + 2y, 1/2, 1/2$	$2x, 2y, 0/1$	$1/2 + x+y, 1/2 + x-y, 1/2$	—	—	—	—
$C_{4v}^5 - P4cc$	—	—	—	$x+y, y+x, 1/2;$ $x-y, x-y, 1/2$	—	$2x, 0, 1/2;$ $2y, 0, 1/2$	—	—	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 0/2$	—	—	—	—	—
$C_{4v}^6 - P4nc$	—	—	—	$1/2 + x+y, 1/2 + y+x, 1/2;$ $1/2 + x-y, 1/2 + x-y, 1/2$	—	—	—	$1/2 + 2x, 1/2, 1/2;$ $1/2 + 2y, 1/2, 1/2$	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 0/2$	—	—	—	—	—
$C_{4v}^7 - P4mc$	—	—	—	$x+y, y+x, 1/2;$ $x-y, x-y, 1/2$	$2x, 0, 0/2;$ $2y, 0, 0/2$	—	—	—	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 1/2$	—	—	—	—	—
$C_{4v}^8 - P4bc$	—	—	—	$1/2 + x+y, 1/2 + y+x, 1/2;$ $1/2 + x-y, 1/2 + x-y, 1/2$	—	—	$1/2 + 2x, 1/2, 0/2;$ $1/2 + 2y, 1/2, 0/2$	—	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 1/2$	$x+y, x-y, 1/2$	—	—	—	—
$D_4^1 - P42$	—	—	—	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 2z/1$	—	$x+y, y+x, 2z/1;$ $x-y, x-y, 2z/1$	$2x, 0, 2z/1;$ $2y, 0, 2z/1$	—	—
$D_4^2 - P42_1$	—	—	—	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1;$ $1/2 + x+y, 1/2 + x-y, 0/2$	—	$x+y, y+x, 2z/1;$ $x-y, x-y, 2z/1$	—	$1/2 + 2x, 1/2, 2z/1;$ $1/2 + 2y, 1/2, 2z/1$	—
$D_4^3 - P4_12$	—	—	—	—	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 1/1$	$x+y, y+x, 1/2 + 2z/1;$ $x-y, x-y, 1/2 + 2z/1$	$2x, 0, 2z/1;$ $2y, 0, 1/2 + 2z/1$	—	$x+y, x-y, 1/1$
$D_4^4 - P4_32$	—	—	—	—	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 1/1$	$x+y, y+x, 1/2 + 2z/1;$ $x-y, x-y, 1/2 + 2z/1$	$2x, 0, 2z/1;$ $2y, 0, 1/2 + 2z/1$	—	$x+y, x-y, 3/1$

Leere Seite
Blank page
Page vide

Tabelle 1 (2. Fortsetzung)

$D_{4h}^1 - P4/mmm$	2g	2h	4j	4k	4l	4m	4n	4o	8p	8q	8r	8s	8t	16u
$D_{4h}^1 - P4_1 2_1$	—	—	—	—	—	—	—	—	2x, 2y, 1/1	—	x-y, x-y, 2z/1; x+y, x+y, 1/2-2z/1	—	1/2+2x, 1/2, 1/2+2z/1; 1/2+2y, 1/2, 1/2+2z/1	1/2+x-y, 1/2+x+y, 1/4/1
$D_{4h}^2 - P4_3 2_1$	—	—	—	—	—	—	—	—	2x, 2y, 1/1	—	x-y, x-y, 2z/1; x+y, y+x, 1/2-2z/1	—	1/2+2x, 1/2, 1/2+2z/1; 1/2+2y, 1/2, 1/2+2z/1	1/2+x-y, 1/2+x+y, 3/4/1
$D_{4h}^3 - P4_2 2$	—	—	—	—	—	—	—	—	2x, 2y, 0/1	x+y, x-y, 1/2	x+y, y+x, 1/2+2z/1; x-y, x-y, 1/2+2z/1	2x, 0, 2z/1; 2y, 0, 2z/1	—	—
$D_{4h}^4 - P4_2 2_1$	—	—	—	—	—	—	—	—	2x, 2y, 0/1	1/2+x+y, 1/2+x-y, 1/2	x-y, x-y, 2z/1	—	1/2+2x, 1/2, 1/2+2z/1; 1/2+2y, 1/2, 1/2-2z/1	—
$D_{4h}^5 - P4/mmm$	0, 0, 2z/8	—	x+y, y+x, 0/4; x-y, x-y, 0/4	—	2x, 0, 0/4; 2y, 0, 0/4	—	—	—	2x, 2y, 0/2; x+y, x-y, 0/4	—	x+y, y+x, 2z/2; x-y, x-y, 2z/2	2x, 0, 2z/2; 2y, 0, 2z/2	—	2x, 2y, 2z/1; x+y, x-y, 2z/2
$D_{4h}^6 - P4/mcc$	0, 0, 2z/8	—	—	x+y, y+x, 1/4	—	2x, 0, 1/4; 0, 2y, 1/4	—	—	2x, 2y, 0/2; x+y, y-x, 0/4	x-y, y-x, 1/2	x-y, y-x, 2z/2; x+y, y+x, 1/2+2z/2	2x, 0, 1/2+2z/2; 0, 2y, 1/2+2z/2	—	2x, 2y, 2z/1; x+y, y-x, 2z/2
$D_{4h}^7 - P4/nbm$	—	1/2, 1/2, 2z/8	1/2+x+y, 1/2+y+x, 0/4; 1/2+x-y, 1/2+y-x, 0/4	—	—	—	1/2, 1/2+2y, 0/4; 1/2+2x, 1/2, 0/4	—	2x, 2y, 0/2; x+y, y-x, 0/4	—	x+y, y+x, 2z/2; x-y, y-x, 2z/2	2x, 0, 2z/2; 0, 2y, 2z/2	—	1/2+x+y, 1/2+y-x, 2z/2; 1/2+2x, 1/2+2y, 1/2+2z/1; 1/2+x+y, 1/2+y-x, 1/2+2z/2
$D_{4h}^8 - P4/nnc$	—	1/2, 1/2, 1/2+2z/8	—	1/2+x-y, 1/2+y-x, 1/4; 1/2+x+y, 1/2+y+x, 1/4	—	—	—	1/2+2x, 1/2, 1/4; 1/2, 1/2+2y, 1/4	2x, 2y, 0/2; x+y, y-x, 0/4	—	x-y, y-x, 2z/2; x+y, y+x, 2z/2	2x, 0, 2z/2; 0, 2y, 2z/2	—	1/2+2x, 1/2+2y, 1/2+2z/1; 1/2+x+y, 1/2+y-x, 1/2+2z/2
$D_{4h}^9 - P4/mbm$	0, 0, 2z/8	—	1/2+x-y, 1/2+y-x, 0/4; 1/2+x+y, 1/2+y+x, 0/4	—	—	—	1/2, 1/2+2y, 0/4; 1/2+2x, 1/2, 0/4	—	2x, 2y, 0/2; x+y, y-x, 0/4	—	1/2+x+y, 1/2+y+x, 2z/2; 1/2+x-y, 1/2+y-x, 2z/2	—	1/2+2x, 1/2, 2z/2; 1/2, 1/2+2y, 2z/2	2x, 2y, 2z/1; x+y, y-x, 2z/2
$D_{4h}^{10} - P4/mnc$	0, 0, 2z/8	—	—	1/2+x-y, 1/2+y-x, 1/4; 1/2+x+y, 1/2+y+x, 1/4	—	—	—	1/2, 1/2+2y, 1/4; 1/2+2x, 1/2, 1/4	2x, 2y, 0/2; x+y, y-x, 0/4	—	1/2+x+y, 1/2+y+x, 1/2+2z/2; 1/2+x-y, 1/2+y-x, 1/2+2z/2	—	1/2+2x, 1/2, 2z/2; 1/2, 1/2+2y, 1/2+2z/2	2x, 2y, 2z/1; x+y, y-x, 2z/2
$D_{4h}^{11} - P4/nmm$	—	1/2, 1/2, 2z/8	1/2+x+y, 1/2+y+x, 0/4; 1/2+x-y, 1/2+y-x, 0/4	—	2x, 0, 0/4; 0, 2y, 0/4	—	—	—	2x, 2y, 0/2; 1/2+x+y, 1/2+y-x, 0/4	—	x-y, y-x, 2z/2	—	1/2, 1/2+2y, 2z/2	1/2+2x, 1/2+2y, 2z/1; x+y, y-x, 2z/2
$D_{4h}^{12} - P4/ncc$	—	1/2, 1/2, 2z/8	—	1/2+x+y, 1/2+y+x, 1/4; 1/2+x-y, 1/2+y-x, 1/4	—	2x, 0, 1/4; 0, 2y, 1/4	—	—	2x, 2y, 0/2; 1/2+x+y, 1/2+y-x, 0/4	—	x+y, y+x, 1/2+2z/1; x-y, y-x, 1/2+2z/1	—	1/2, 1/2+2y, 2z/2	1/2+2x, 1/2+2y, 2z/1; x+y, y-x, 2z/2
$D_{4h}^{13} - P4/mmc$	0, 0, 2z/8	—	—	x+y, y+x, 1/4; x-y, y-x, 1/4	—	—	—	—	2x, 2y, 0/2	x+y, y-x, 1/4	x+y, y-x, 1/2+2z/2	2x, 0, 2z/2; 0, 2y, 2z/2	—	2x, 2y, 2z/1; x+y, y-x, 1/2+2z/2
$D_{4h}^{14} - P4/nbc$	—	1/2, 1/2, 1/2+2z/8	—	x+y, y+x, 1/4; x-y, y-x, 1/4	—	—	1/2+2x, 1/2, 0/4; 1/2, 1/2+2y, 0/4	—	2x, 2y, 0/2	1/2+x-y, 1/2+y+x, 1/4	1/2+x+y, 1/2+y+x, 2z/2; 1/2+x-y, 1/2+y-x, 2z/2	2x, 0, 1/2+2z/2; 0, 2y, 1/2+2z/2	—	1/2+2x, 1/2+2y, 1/2+2z/1; x+y, y-x, 2z/2
$D_{4h}^{15} - P4/nmm$	—	1/2, 1/2, 1/2+2z/8	x+y, y+x, 0/4; x-y, y-x, 0/4	—	—	—	—	1/2+2x, 1/2, 1/4; 1/2, 1/2+2y, 1/4	2x, 2y, 0/2	1/2+x+y, 1/2+y-x, 1/4	1/2+x+y, 1/2+y+x, 1/2+2z/2; 1/2+x-y, 1/2+y-x, 1/2+2z/2	2x, 0, 2z/2; 0, 2y, 2z/2	—	1/2+2x, 1/2+2y, 1/2+2z/1; x+y, y-x, 2z/2
$D_{4h}^{16} - P4/mbc$	0, 0, 2z/8	—	—	1/2+x+y, 1/2+x+y, 1/4; 1/2+x-y, 1/2-x+y, 1/4	—	—	1/2+2x, 1/2, 0/4; 1/2, 1/2+2y, 0/4	—	2x, 2y, 0/2	x+y, y-x, 1/4	x+y, y-x, 1/2+2z/4; 1/2+x-y, 1/2-x+y, 1/2+2z/2	—	1/2+2x, 1/2, 2z/2; 1/2, 1/2+2y, 2z/2	2x, 2y, 2z/1; 1/2+x+y, 1/2+y+x, 1/2+2z/1
$D_{4h}^{17} - P4/mmm$	0, 0, 2z/8	—	x+y, y+x, 0/4; x-y, y-x, 0/4	—	—	—	—	1/2+2x, 1/2, 1/4; 1/2, 1/2+2y, 1/4	2x, 2y, 0/2	1/2+x-y, 1/2+y+x, 1/4	x+y, y+x, 2z/2; x-y, y-x, 2z/2	—	1/2, 1/2+2y, 2z/2	1/2+x-y, 1/2+x+y, 1/2+2z/2; 1/2+2x, 1/2+2y, 1/2+2z/1; x+y, y-x, 2z/2
$D_{4h}^{18} - P4/nmc$	—	1/2, 1/2, 1/2+2z/8	1/2+x+y, 1/2+y+x, 0/4; 1/2+x-y, 1/2+y-x, 0/4	—	2x, 0, 0/4; 0, 2y, 0/4	—	—	—	2x, 2y, 0/2	1/2+x+y, 1/2+y-x, 1/4	x+y, y+x, 1/2+2z/2; x-y, y-x, 1/2+2z/2	—	1/2, 1/2+2y, 2z/2	1/2+2x, 1/2+2y, 1/2+2z/1; x+y, y-x, 2z/2
$D_{4h}^{19} - P4/ncm$	—	1/2, 1/2, 1/2+2z/8	1/2+x+y, 1/2+y+x, 0/4; 1/2+x-y, 1/2+y-x, 0/4	—	—	2x, 0, 1/4; 0, 2y, 1/4	—	—	2x, 2y, 0/2	1/2+x+y, 1/2+y-x, 1/4	x+y, y+x, 1/2+2z/2; x-y, y-x, 1/2+2z/2	—	1/2, 1/2+2y, 2z/2	1/2+2x, 1/2+2y, 1/2+2z/1; x+y, y-x, 2z/2

Leere Seite
Blank page
Page vide

Tabelle 1 (3. Fortsetzung)

$D_{4h}^{17} - I4/mmm$	4 e	8 g	8 h	8 i	8 j	16 k	16 l	16 m	16 n	32 o
$D_{2d}^0 - I\bar{4}m2$	—	—	—	2x, 0, 0/4; 2y, 0, 0/4	—	—	2x, 2y, 0/2	x + y, y + x, 2z/2; x - y, y - x, 2z/2	—	x - y, y - x, 2z/2
$D_{2d}^{10} - I\bar{4}c2$	—	—	—	—	2x, 0, $\frac{1}{2}/4$; 2y, 0, $\frac{1}{2}/4$	—	2x, 2y, 0/2	x + y, y + x, $\frac{1}{2} + 2z/2$; x - y, x - y, $\frac{1}{2} + 2z/2$	—	x + y, x - y, 2z/2
$D_{2d}^{11} - I\bar{4}2m$	—	—	x + y, y + x, 0/4; y - x, y - x, 0/4	—	—	—	2x, 2y, 0/2	—	2x, 0, 2z/2; 2y, 0, 2z/2	x + y, y - x, 2z/2
$D_{2d}^{15} - I\bar{4}2d$	—	—	—	—	—	x - y, $\frac{1}{2} + x - y$, $\frac{1}{2}/2$; x + y, $\frac{1}{2} + x + y$, $\frac{3}{2}/2$	2x, 2y, 0/2	—	2x + $\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{4} + 2z/2$; 2y + $\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{4} - 2z/2$	x + y, y - x, 2z/2
$C_{4v}^9 - I4mm$	—	—	x + y, y + x, 0/4; x - y, x - y, 0/4	2x, 0, 0/4; 2y, 0, 0/4	—	—	2x, 2y, 0/2; x + y, x - y, 0/4	—	—	—
$C_{4v}^{10} - I4cm$	—	—	x + y, y + x, 0/4; x - y, x - y, 0/4	—	2x, 0, $\frac{1}{2}/4$; 2y, 0, $\frac{1}{2}/4$	—	2x, 2y, 0/2; x + y, x - y, $\frac{1}{2}/4$	—	—	—
$C_{4v}^{11} - I4md$	—	—	—	2x, 0, 0/4; 2y, 0, 0/4	—	x + y, $\frac{1}{2} + x + y$, $\frac{3}{2}/2$; x - y, $\frac{1}{2} + x - y$, $\frac{3}{2}/2$	2x, 2y, 0/2	—	—	x + y, $\frac{1}{2} + x - y$, $\frac{1}{2}/2$
$C_{4v}^{12} - I4cd$	—	—	—	—	2x, 0, $\frac{1}{2}/4$; 2y, 0, $\frac{1}{2}/4$	x + y, $\frac{1}{2} + x + y$, $\frac{1}{2}/2$; y - x, $\frac{1}{2} + y - x$, $\frac{1}{2}/2$	—	—	—	x + y, $\frac{1}{2} + y - x$, $\frac{1}{2}/2$
$D_4^0 - I42$	—	—	—	—	—	—	2x, 2y, 0/2; x + y, x - y, 0/4 2x, 2y, 0/2	x + y, y + x, 2z/2; x - y, x - y, 2z/2	2x, 0, 2z/2; 2y, 0, 2z/2	—
$D_4^{10} - I4_12$	—	—	—	—	—	—	2x, 2y, 0/2	x + y, y + x, 2z/2; x - y, x - y, 2z/2	2x + $\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{4} + 2z/2$; 2y + $\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{4} - 2z/2$	x + y, $\frac{1}{2} + x - y$, $\frac{1}{2}/2$
$D_{4h}^{17} - I4/mmm$	0, 0, 2z/16	—	x + y, y + x, 0/8; x - y, x - y, 0/8	2x, 0, 0/8; 2y, 0, 0/8	—	—	2x, 2y, 0/4; x + y, x - y, 0/8	x + y, x + y, 2z/4; x - y, x - y, 2z/4	2x, 0, 2z/4; 2y, 0, 2z/4	2x, 2y, 2z/2; x + y, x - y, 2z/4
$D_{4h}^{18} - I4/mcm$	0, 0, 2z/16	—	x + y, y + x, $\frac{1}{2}/8$	—	2x, 0, $\frac{1}{2}/8$; 0, 2y, $\frac{1}{2}/8$	—	2x, 2y, 0/4; x + y, y - x, 0/8; x - y, y - x, $\frac{1}{2}/4$	x - y, y - x, $\frac{1}{2} + 2z/4$; x + y, y + x, $\frac{1}{2} + 2z/4$	2x, 0, $\frac{1}{2} + 2z/4$; 0, 2y, $\frac{1}{2} + 2z/4$	2x, 2y, 2z/2; 2x, 2y, 2z/2; x + y, y - x, 2z/2
$D_{4h}^{20} - I4/amd$	—	0, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{4} + 2z/8$	—	2x, 0, 0/8; 0, 2y, 0/8	—	x + y, $\frac{1}{2} + x + y$, $\frac{3}{4}/4$; x - y, $\frac{1}{2} + y - x$, $\frac{3}{4}/4$	2x, 2y, 0/4	x + y, x + y, 2z/4; x - y, y - x, 2z/4	2x, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{4} + 2z/4$; 0, $\frac{1}{2} + 2y$, $\frac{3}{4} + 2z/4$	x + y, y - x, 2z/4; 2x, $\frac{1}{2} + 2y$, $\frac{3}{4} + 2z/2$;
$D_{4h}^{20} - I4/acd$	—	0, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{4} + 2z/8$	—	—	2x, 0, $\frac{1}{2}/8$; 0, 2y, $\frac{1}{2}/8$	x + y, $\frac{1}{2} + x + y$, $\frac{1}{4}/4$; y - x, $\frac{1}{2} + y - x$, $\frac{1}{4}/4$	2x, 2y, 0/4	x + y, y + x, $\frac{1}{2} + 2z/4$; x - y, y - x, $\frac{1}{2} + 2z/4$	2x, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2} + 2z/4$; 0, $\frac{1}{2} + 2y$, $\frac{1}{2} + 2z/4$	x + y, $\frac{1}{2} + y - x$, $\frac{3}{4}/4$; x + y, y - x, 2z/4; 2x, $\frac{1}{2} + 2y$, $\frac{3}{4} + 2z/2$; x + y, $\frac{1}{2} + y - x$, $\frac{3}{4}/4$

Leere Seite
Blank page
Page vide

Tabelle 2	xyz	$\bar{x}\bar{y}z$	$x+y, \frac{1}{2}-z$	$\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}-z$	$\bar{y}x\bar{z}$	$y\bar{x}\bar{z}$	$\frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+z$	$\frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+z$
xyz	$0, 0, 0$	$2\bar{x}, 2\bar{y}, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}-2z$	$\frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}-2z$	$-y-x, \frac{x-y}{2z}$	$y-x, \frac{-x-y}{2z}$	$\frac{1}{2}-y-x, \frac{1}{2}+x-y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+y-x, \frac{1}{2}-x-y, \frac{1}{2}$
$\bar{x}\bar{y}z$	$2x, 2y, 0$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}-2z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}-2z$	$-y+x, \frac{x+y}{2z}$	$y+x, \frac{-x+y}{2z}$	$\frac{1}{2}+y+x, \frac{1}{2}-x+y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+y+x, \frac{1}{2}-x+y, \frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}+2z$	$0, 0, 0$	$2x, 2y, 0$	$\frac{1}{2}-y-x, \frac{1}{2}+x-y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+y-x, \frac{1}{2}-x-y, \frac{1}{2}$	$-y-x, x-y, 2z$	$y-x, -x-y, 2z$
$\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}-z$	$\frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}+2z$	$2x, 2y, 0$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}-y+x, \frac{1}{2}+x+y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+y+x, \frac{1}{2}-x+y, \frac{1}{2}$	$-y+x, x+y, 2z$	$y+x, -x+y, 2z$
$\bar{y}x\bar{z}$	$x+y, y-x, 2z$	$-x+y, -y-x, 2z$	$\frac{1}{2}+x+y, \frac{1}{2}+y-x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-x+y, \frac{1}{2}-y-x, \frac{1}{2}$	$0, 0, 0$	$2y, 2x, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}+2z$
$y\bar{x}\bar{z}$	$x-y, y+x, 2z$	$-x-y, -y+x, 2z$	$\frac{1}{2}+x-y, \frac{1}{2}+y+x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-x-y, \frac{1}{2}-y+x, \frac{1}{2}$	$2y, 2x, 0$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}+2z$
$\frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+z$	$\frac{1}{2}+x+y, \frac{1}{2}+y-x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-x+y, \frac{1}{2}-y-x, \frac{1}{2}$	$x+y, y-x, \frac{y-x}{2z}$	$-x+y, -y-x, \frac{y-x}{2z}$	$\frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}-2z$	$\frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}-2z$	$0, 0, 0$	$2y, 2x, 0$
$\frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+z$	$\frac{1}{2}+x-y, \frac{1}{2}+y+x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-x-y, \frac{1}{2}-y+x, \frac{1}{2}$	$x-y, y+x, \frac{y+x}{2z}$	$-x-y, -y+x, \frac{y+x}{2z}$	$\frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}-2z$	$\frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}-2z$	$2y, 2x, 0$	$0, 0, 0$

Tabelle 3	xyz	$\bar{x}\bar{y}z$	$y\bar{x}\bar{z}$	$\bar{y}x\bar{z}$	$\bar{y}x\bar{z}$	$\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z$	$\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z$	$\frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-z$	$\frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-z$
xyz	$0, 0, 0$	$2x, 2y, 0$	$y-x, \frac{-x-y}{2z}$	$-y-x, \frac{x-y}{2z}$	$\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z$	$\frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+y-x, \frac{1}{2}-x-y, \frac{1}{2}-2z$	$\frac{1}{2}-y-x, \frac{1}{2}+x-y, \frac{1}{2}-2z$
$\bar{x}\bar{y}z$	$2x, 2y, 0$	$0, 0, 0$	$y+x, \frac{-x+y}{2z}$	$-y+x, \frac{x+y}{2z}$	$\frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+y+x, \frac{1}{2}-x+y, \frac{1}{2}-2z$	$\frac{1}{2}-y+x, \frac{1}{2}+x+y, \frac{1}{2}-2z$
$y\bar{x}\bar{z}$	$x-y, y+x, 2z$	$-x-y, -y+x, 2z$	$0, 0, 0$	$2y, 2x, 0$	$\frac{1}{2}+x-y, \frac{1}{2}+y+x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}-x-y, \frac{1}{2}-y+x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}-x-y, \frac{1}{2}-y+x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}+y-x, \frac{1}{2}-y+x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}-y-x, \frac{1}{2}+x+y, \frac{1}{2}-2z$
$\bar{y}x\bar{z}$	$x+y, y-x, 2z$	$-x+y, -y-x, 2z$	$2y, 2x, 0$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}+x+y, \frac{1}{2}+y-x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}-x+y, \frac{1}{2}-y-x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}-x+y, \frac{1}{2}-y-x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+y-x, \frac{1}{2}-x-y, \frac{1}{2}-2z$	$\frac{1}{2}-y-x, \frac{1}{2}+x-y, \frac{1}{2}-2z$	$0, 0, 0$	$0, 0, 0$	$2x, 2y, 0$	$y-x, -x-y, \frac{x-y}{2z}$	$-y-x, x-y, \frac{x-y}{2z}$
$\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z$	$\frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-x-y, \frac{1}{2}-y+x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}+y+x, \frac{1}{2}-x+y, \frac{1}{2}-2z$	$\frac{1}{2}-y-x, \frac{1}{2}+x-y, \frac{1}{2}-2z$	$\frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}+2y, 0$	$0, 0, 0$	$0, 0, 0$	$y+x, -x+y, \frac{-x+y}{2z}$	$-y+x, x+y, \frac{x+y}{2z}$
$\frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-z$	$\frac{1}{2}+x-y, \frac{1}{2}+y+x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}-x-y, \frac{1}{2}-y+x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}+2y, 0$	$0, 0, 0$	$0, 0, 0$	$0, 0, 0$	$2y, 2x, 0$
$\frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-z$	$\frac{1}{2}+x+y, \frac{1}{2}+y-x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}-x+y, \frac{1}{2}-y-x, \frac{1}{2}+2z$	$\frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}+2y, \frac{1}{2}-2x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-2y, \frac{1}{2}+2x, \frac{1}{2}$	$2y, 2x, 0$	$0, 0, 0$