

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

Autor(en): **Nowacki, Werner**

Objekttyp: **Article**

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

Band (Jahr): **33 (1953)**

Heft 1

PDF erstellt am: **06.08.2024**

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

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

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

Tabelle 1 (1. Fortsetzung)

$D_{ik}^* - P4/mm$	2g	2h	4j	4k	4l	4m	4n	4o	8p	8q	8r	8s	8t	16u
$D_{ik}^* - P42m$	—	—	$x+y, y+x, 0/2;$ $y-x, y-x, 0/2$	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	—	$2x, 0, 2z/1;$ $2y, 0, 2z/1$	—	$x+y, y-x, 2z/1$
$D_{ik}^* - P42c$	—	—	$x+y, y+x, 1/2;$ $x-y, x-y, 1/2$	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	—	$2x, 0, 1/2+2z/1;$ $0, 2y, 1/2+2z/1$	—	$x+y, y-x, 2z/1$
$D_{ik}^* - P42,m$	—	—	$x-y, x-y, 1/2$	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	—	—	$1/2+2x, 1/2, 2z/1;$ $1/2+2y, 1/2, 2z/1$	$x+y, y-x, 2z/1$
$D_{ik}^* - P42,c$	—	—	$1/2+x+y, 1/2+y+x, 0/2;$ $1/2+x-y, 1/2-x-y, 0/2$	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	—	—	$1/2+2x, 1/2, 2z/1;$ $1/2+2y, 1/2, 2z/1;$ $1/2+2y, 1/2, 1-2z/1$	$x+y, y-x, 2z/1$
$D_{ik}^* - P4m2$	—	—	—	—	$2x, 0, 0/2;$ $2y, 0, 0/2$	—	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	$x+y, y+x, 2z/1;$ $x-y, y-x, 2z/1$	—	—	$x+y, y-x, 2z/1$
$D_{ik}^* - P4c2$	—	—	—	—	—	$2x, 0, 1/2;$ $2y, 0, 1/2$	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	$x+y, y-x, 1/2+2z/1;$ $x-y, x-y, 1/2+2z/1$	—	—	$x+y, x-y, 2z/1$
$D_{ik}^* - P4b2$	—	—	—	—	—	—	$1/2+2x, 1/2, 0/2;$ $1/2+2y, 1/2, 0/2$	—	$2x, 2y, 0/1$	—	$1/2+x+y, 1/2+y+x, 2z/1;$ $1/2+x-y, 1/2-x-y, 2z/1$	—	—	$x+y, x-y, 2z/1$
$D_{ik}^* - P4n2$	—	—	—	—	—	—	—	$1/2+2x, 1/2, 1/2;$ $1/2+2y, 1/2, 1/2$	$2x, 2y, 0/1$	—	$1/2+x+y, 1/2+x-y, 1/2+2z/1;$ $1/2-x-y, 1/2-x-y, 1/2+2z/1$	—	—	$x+y, x-y, 2z/1$
$C_{ik}^* - P4mm$	—	—	$x+y, y+x, 0/2;$ $x-y, x-y, 0/2$	—	$2x, 0, 0/2;$ $2y, 0, 0/2$	—	—	—	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 0/2$	—	—	—	—	—
$C_{ik}^* - P4bm$	—	—	$1/2+x+y, 1/2+y+x, 0/2;$ $1/2+x-y, 1/2-x-y, 0/2$	—	—	—	$1/2+2x, 1/2, 0/2;$ $1/2+2y, 1/2, 0/2$	—	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 0/2$	—	—	—	—	—
$C_{ik}^* - P4cm$	—	—	$x+y, y+x, 0/2;$ $x-y, x-y, 0/2$	—	—	$2x, 0, 1/2;$ $2y, 0, 1/2$	—	—	$2x, 2y, 0/1$	—	$x+y, x-y, 1/2$	—	—	—
$C_{ik}^* - P4nm$	—	—	$x+y, y+x, 0/2;$ $x-y, x-y, 0/2$	—	—	—	—	$1/2+2x, 1/2, 1/2;$ $1/2+2y, 1/2, 1/2$	$2x, 2y, 0/1$	—	$1/2+x+y, 1/2+x-y, 1/2$	—	—	—
$C_{ik}^* - P4cc$	—	—	—	$x+y, y+x, 1/2;$ $x-y, x-y, 1/2$	—	$2x, 0, 1/2;$ $2y, 0, 1/2$	—	—	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 0/2$	—	—	—	—	—
$C_{ik}^* - P4nc$	—	—	—	$1/2+x+y, 1/2+y+x, 1/2;$ $1/2+x-y, 1/2-x-y, 1/2$	—	—	—	$1/2+2x, 1/2, 1/2;$ $1/2+2y, 1/2, 1/2$	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 0/2$	—	—	—	—	—
$C_{ik}^* - P4mc$	—	—	—	$x+y, y+x, 1/2;$ $x-y, x-y, 1/2$	$2x, 0, 0/2;$ $2y, 0, 0/2$	—	—	—	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 1/2$	—	—	—	—	—
$C_{ik}^* - P4bc$	—	—	—	$1/2+x+y, 1/2+y+x, 1/2;$ $1/2+x-y, 1/2-x-y, 1/2$	—	—	$1/2+2x, 1/2, 0/2;$ $1/2+2y, 1/2, 0/2$	—	$2x, 2y, 0/1$	—	$x+y, x-y, 1/2$	—	—	—
$D_{ik}^* - P42$	—	—	—	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1;$ $x+y, x-y, 0/2$	—	$x+y, y+x, 2z/1;$ $x-y, x-y, 2z/1$	$2x, 0, 2z/1;$ $2y, 0, 2z/1$	—	—
$D_{ik}^* - P42_1$	—	—	—	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 0/1;$ $1/2+x+y, 1/2+x-y, 0/2$	—	$x+y, y+x, 2z/1;$ $x-y, x-y, 2z/1$	—	$1/2+2x, 1/2, 2z/1;$ $1/2+2y, 1/2, 2z/1$	—
$D_{ik}^* - P4_2$	}	}	—	—	—	—	—	—	—	$2x, 2y, 1/1$	$x+y, y+x, 1/2+2z/1;$ $x-y, x-y, 1/2+2z/1$	$2x, 0, 2z/1;$ $2y, 0, 1/2+2z/1$	—	$x+y, x-y, 1/1$
$D_{ik}^* - P4_2$														

Leere Seite
Blank page
Page vide

Tabelle 1 (2. Fortsetzung)

$D_{15}^I - P4/mmm$	2g	2h	4j	4k	4l	4m	4n	4o	8p	8q	8r	8s	8t	16u
$D_{15}^I - P4, 2_1$	—	—	—	—	—	—	—	—	2x, 2y, 1/1	—	x-y, x-y, 2z/1; x+y, x+y, 1-2z/1	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2z/1$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/1$	$\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2}$
$D_{15}^I - P4, 2_2$	—	—	—	—	—	—	—	—	2x, 2y, 1/1	—	x-y, y-x, 2z/1; x+y, y+x, 1-2z/1	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2z/1$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/1$	$\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2}$
$D_{15}^I - P4, 2_3$	—	—	—	—	—	—	—	—	2x, 2y, 0/1	x+y, x-y, 1/2	x+y, y+x, 1+2z/1; x-y, x-y, 1-2z/1	2x, 0, 2z/1; 2y, 0, 2z/1	—	—
$D_{15}^I - P4, 2_4$	—	—	—	—	—	—	—	—	2x, 2y, 0/1	$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2}$	x-y, y-x, 2z/1	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2z/1$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} - 2z/1$	—
$D_{15}^I - P4/mmm$	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, 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
$D_{15}^I - P4/mcc$	0, 0, 2z/8	—	—	x+y, y+x, 1/4	—	2x, 0, 1/4; 0, 2y, 1/4	—	—	x+y, y-x, 0/4	x-y, y-x, 1/2	x-y, y-x, 1+2z/2; x+y, y+x, 1+2z/2	2x, 0, 1+2z/2; 0, 2y, 1+2z/2	—	2x, 2y, 2z/1; x+y, y-x, 2z/2
$D_{15}^I - P4/nbc$	—	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2z/8$	$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y + x, 0/4$; $\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + y - x, 0/4$	—	—	—	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 0/4$; $\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 0/4$	—	2x, 2y, 0/2	—	x+y, y-x, 2z/2; x-y, y-x, 2z/2	2x, 0, 2z/2; 0, 2y, 2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y, 2z/1$; $\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y, 2z/1$
$D_{15}^I - P4/ncc$	—	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/8$	—	$\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + y - x, 1/4$; $\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y + x, 1/4$	—	—	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 1/4$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 1/4$	2x, 2y, 0/2	—	x+y, y-x, 2z/2; x-y, y-x, 2z/2	2x, 0, 2z/2; 0, 2y, 2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/2$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2$
$D_{15}^I - P4/nbc$	0, 0, 2z/8	—	$\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + y - x, 0/4$; $\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y + x, 0/4$	—	—	—	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 0/4$; $\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 0/4$	—	2x, 2y, 0/2	—	x+y, y-x, 2z/2; x-y, y-x, 2z/2	2x, 0, 2z/2; 0, 2y, 2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/2$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2$
$D_{15}^I - P4/ncc$	0, 0, 2z/8	—	—	$\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + y - x, 1/4$; $\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y + x, 1/4$	—	2x, 0, 0/4; 0, 2y, 0/4	—	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 1/4$; $\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 1/4$	2x, 2y, 0/2	—	x+y, y-x, 1+2z/1; x-y, y-x, 1+2z/1	2x, 0, 1+2z/2; 0, 2y, 1+2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y, 2z/1$; $\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y, 2z/1$
$D_{15}^I - P4/mmm$	—	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2z/8$	$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y + x, 0/4$; $\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + y - x, 0/4$	—	—	—	—	—	2x, 2y, 0/2	—	x+y, y-x, 2z/2; x-y, y-x, 2z/2	2x, 0, 2z/2; 0, 2y, 2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/2$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2$
$D_{15}^I - P4/ncc$	—	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2z/8$	—	$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y + x, 1/4$; $\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + y - x, 1/4$	—	2x, 0, 1/4; 0, 2y, 1/4	—	—	2x, 2y, 0/2	—	x+y, y-x, 1+2z/1; x-y, y-x, 1+2z/1	2x, 0, 1+2z/2; 0, 2y, 1+2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y, 2z/1$; $\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y, 2z/1$
$D_{15}^I - P4/mcc$	0, 0, 2z/8	—	—	$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y + x, 1/4$; $\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + y - x, 1/4$	—	2x, 0, 0/4; 0, 2y, 0/4	—	—	2x, 2y, 0/2	—	x+y, y-x, 2z/2; x-y, y-x, 2z/2	2x, 0, 2z/2; 0, 2y, 2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/2$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2$
$D_{15}^I - P4/mcc$	0, 0, 2z/8	—	x+y, y+x, 0/4; x-y, y-x, 0/4	—	—	2x, 0, 1/4; 0, 2y, 1/4	—	—	2x, 2y, 0/2	x+y, y-x, 1/4	x-y, y-x, 1+2z/2; x+y, y+x, 1+2z/2	2x, 0, 1+2z/2; 0, 2y, 1+2z/2	—	2x, 2y, 2z/1; x-y, y-x, 1+2z/2
$D_{15}^I - P4/nbc$	—	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/8$	—	x+y, y+x, 1/4; x-y, y-x, 1/4	—	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 0/4$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 0/4$	—	2x, 2y, 0/2	$\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + y + x, \frac{1}{4}$	x+y, y-x, 2z/2; x-y, y-x, 2z/2	2x, 0, 1+2z/2; 0, 2y, 1+2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/2$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2$
$D_{15}^I - P4/nbc$	0, 0, 2z/8	—	—	$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y + x, 1/4$; $\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + y - x, 1/4$	—	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 0/4$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 1/4$	—	2x, 2y, 0/2	$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y - x, \frac{1}{4}$	x+y, y-x, 2z/2; x-y, y-x, 2z/2	2x, 0, 2z/2; 0, 2y, 2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/2$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2$
$D_{15}^I - P4/mmm$	0, 0, 2z/8	—	x+y, y+x, 0/4; x-y, y-x, 0/4	—	—	—	—	—	2x, 2y, 0/2	—	x+y, y-x, 1+2z/4; x-y, y-x, 1+2z/4	2x, 0, 1+2z/2; 0, 2y, 1+2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/2$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2$
$D_{15}^I - P4/ncc$	—	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/8$	—	$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y + x, 1/4$; $\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + y - x, 1/4$	—	2x, 0, 0/4; 0, 2y, 0/4	—	—	2x, 2y, 0/2	$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y - x, \frac{1}{4}$	x+y, y-x, 2z/2; x-y, y-x, 2z/2	2x, 0, 2z/2; 0, 2y, 2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/2$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2$
$D_{15}^I - P4/ncc$	—	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/8$	$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y + x, 0/4$; $\frac{1}{2} + x - y, \frac{1}{2} + y - x, 0/4$	—	—	—	—	—	2x, 2y, 0/2	$\frac{1}{2} + x + y, \frac{1}{2} + y - x, \frac{1}{4}$	x+y, y-x, 1+2z/2; x-y, y-x, 1+2z/2	2x, 0, 1+2z/2; 0, 2y, 1+2z/2	—	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/2$; $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2$

Leere Seite
Blank page
Page vide

Tabelle 1 (3. Fortsetzung)

$D_{11}^{\text{II}} - I4/mmm$	4 e	8 g	8 h	8 i	8 j	16 k	16 l	16 m	16 n	32 o
$D_{11}^{\text{II}} - I4m2$	—	—	—	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
$D_{11}^{\text{II}} - I4c2$	—	—	—	—	2x, 0, 1/4; 2y, 0, 1/4	—	2x, 2y, 0/2	x+y, y+x, 1/2+2z/2; x-y, x-y, 1/2+2z/2	—	x+y, y-x, 2z/2
$D_{11}^{\text{II}} - I42m$	—	—	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
$D_{11}^{\text{II}} - I42d$	—	—	—	—	—	x-y, 1/2+x-y, 1/2; x+y, 1/2+x+y, 1/2	2x, 2y, 0/2	—	2x+1/2, 0, 1/2+2z/2; 2y+1/2, 0, 1/2+2z/2	x+y, y-x, 2z/2
$C_{11}^{\text{II}} - I4mm$	—	—	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	—	—	—
$C_{11}^{\text{II}} - I4cm$	—	—	x+y, y+x, 0/4; x-y, y+x, 0/4; x-y, x-y, 0/4	—	2x, 0, 1/4; 2y, 0, 1/4	—	2x, 2y, 0/2; x+y, x-y, 1/4	—	—	—
$C_{11}^{\text{II}} - I4md$	—	—	—	2x, 0, 0/4; 2y, 0, 0/4	—	x+y, 1/2+x+y, 1/2; x-y, 1/2+x-y, 1/2	2x, 2y, 0/2	—	—	x+y, 1/2+x-y, 1/2
$C_{11}^{\text{II}} - I4cd$	—	—	—	—	2x, 0, 1/4; 2y, 0, 1/4	—	—	—	—	x+y, 1/2+y-x, 1/2
$D_{11}^{\text{II}} - I42$	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
$D_{11}^{\text{II}} - I4,2$	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
$D_{11}^{\text{II}} - I4/mmm$	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
$D_{11}^{\text{II}} - I4/mcm$	0, 0, 2z/16	—	x+y, y+x, 1/8	—	2x, 0, 1/8; 0, 2y, 1/8	—	2x, 2y, 0/4; x+y, y-x, 0/8; x-y, y-x, 1/4	x-y, y-x, 1/2+2z/4; x+y, y+x, 1/2+2z/4	2x, 0, 1/2+2z/4; 0, 2y, 1/2+2z/4	2x, 2y, 2z/2; x+y, y-x, 2z/2
$D_{11}^{\text{II}} - I4/amd$	—	0, 1/2, 1/2+2z/8	—	2x, 0, 0/8; 0, 2y, 0/8	—	x+y, 1/2+x+y, 1/4; x-y, 1/2+y-x, 1/4	2x, 2y, 0/4	x+y, x+y, 2z/4; x-y, y-x, 2z/4	2x, 1/2, 1/2+2z/4; 0, 1/2+2y, 1/2+2z/4	x+y, y-x, 2z/4; 2x, 1/2+2y, 1/2+2z/2; x+y, 1/2+y-x, 1/4
$D_{11}^{\text{II}} - I4/acd$	—	0, 1/2, 1/2+2z/8	—	—	2x, 0, 1/8; 0, 2y, 1/8	x+y, 1/2+x+y, 1/4; y-x, 1/2+y-x, 1/4	2x, 2y, 0/4	x+y, y+x, 1/2+2z/4; x-y, y-x, 1/2+2z/4	2x, 1/2, 1/2+2z/4; 0, 1/2+2y, 1/2+2z/4	x+y, y-x, 2z/4; 2x, 1/2+2y, 1/2+2z/2; x+y, 1/2+y-x, 1/4

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