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

Band: 31 (1951)

Heft: 2

Artikel: Die symmetriebedingte Vieldeutigkeit in der Molekülspektroskopie

Autor: Niggli, Alfred

DOI: https://doi.org/10.5169/seals-25153

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: 19.07.2025

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

Die symmetriebedingte Vieldeutigkeit in der Molekülspektroskopie [1])

von *Alfred Niggli, Zürich*

I. Einleitung

Die Schwingungen der Atomkerne im Molekül, die sich in den Infrarot- und Ramanspektren äussern können, lassen sich — unter Voraussetzung ihrer Harmonizität — linear aus voneinander unabhängigen Normalschwingungen zusammensetzen. Zahl und Formen dieser Normalschwingungen werden durch den räumlichen Bau des Moleküls, im besondern durch seine Symmetrieeigenschaften festgelegt. Sie sind unabhängig von allen Annahmen über die Kräfteverteilung, unabhängig von den schwingenden Massen und unabhängig von den metrischen Gegebenheiten. All diese Dinge spielen erst dann eine Rolle, wenn es sich um die Bestimmung der Schwingungsfrequenzen handelt, wie etwa bei der Feststellung gewisser Gruppen und Bindungen durch Zuordnung ihrer mehr oder weniger konstanten charakteristischen Frequenzen — eine Methode, die in der Konstitutionsermittlung grosse praktische Bedeutung erlangt hat.

Die Beobachtbarkeit der Normalschwingungen, sei es für sich oder in Kombinationen, in den Infrarot- und Ramanspektren wird durch ihren Einfluss auf das elektrische Moment bzw. die Polarisierbarkeit des Moleküls, also letztlich wiederum durch Symmetrieeigenschaften bestimmt. Die Technik der Zuordnung der einzelnen Schwingungen, bei der alle möglichen Abweichungen vom idealisierten harmonisch schwin-

---

[1]) Von der Philosophischen Fakultät II der Universität Zürich mit dem Hauptpreis bedachte Preisschrift. — Für die Übernahme des größten Teiles der Druckkosten möchte die Schweiz. Min. Petr. Gesellschaft den zuständigen Stellen der Universität und dem Autor den besten Dank abstatten.

genden Massenpunktsystem, wie Anharmonizität und Resonanzeffekte, mitberücksichtigt werden müssen, soll hier nicht behandelt werden. Liegen die auftretenden Normalschwingungen aber einmal vor, dann können schon aus ihrer Anzahl Schlüsse auf den räumlichen Bau des Moleküls gezogen werden. Diese Beziehung zwischen Bau und Normalschwingungen der Moleküle bildet mit ihren Vieldeutigkeiten ein Anwendungsgebiet der Symmetrielehre und der Gegenstand der vorliegenden Arbeit.

II. Die Aussagen der Symmetrielehre über den Molekülbau

Zunächst soll ein Teilchensystem, wie es ein Molekül ja darstellt, auf die Symmetrieeigenschaften seiner Gleichgewichtslage hin betrachtet werden. Weil molekulare Konfigurationen in sich abgeschlossen sind, gehen alle möglichen Symmetrieelemente durch einen Punkt und bilden so eine Punktsymmetriegruppe. Die 32 Kristallklassen geben Beispiele für solche Gruppen; für Moleküle sind indessen die nichtkristallographischen Punktgruppen ebenfalls einzubeziehen, da die durch die Raumgitterstruktur der Kristalle bedingten Einschränkungen wegfallen. Eine vollständige Aufzählung der Punktsymmetriegruppen findet man etwa bei Nowacki (9). In ähnlicher Weise erfüllen die einzelnen Elemente des Teilchensystems, seien es nun Atome oder Ionen, die Forderung der Abgeschlossenheit, so dass auch ihnen Punktsymmetriegruppen zukommen müssen. Dementsprechend soll für die Betrachtung zwischen Lagesymmetrie der Konfiguration und Eigensymmetrie der Teilchen unterschieden werden. Dabei bedeutet die Lagesymmetrie die höchste Punktsymmetriegruppe, die der Konfiguration nach ihrer Anordnung, bei beliebiger Annahme über die Eigensymmetrie der Teilchen, zukommen kann; unter der Eigensymmetrie dagegen wird die Punktsymmetriegruppe verstanden, die einem Teilchen für sich tatsächlich zukommt, wenn es, ohne an seinem Zustand etwas zu ändern, aus dem Verband herausgelöst gedacht wird. Die Eigensymmetrie stimmt demnach mit der Symmetrie des Kraftfeldes an der betreffenden Stelle überein.

Die Annahme, dass sich alle Teilchen kugelsymmetrisch verhalten (Eigensymmetrie K_h), rechtfertigt ihren gedanklichen Ersatz in der Konfiguration durch gestaltlose Massenpunkte. Nach dieser üblichen Abstraktion kann sich nur noch die Lagesymmetrie auswirken; es spricht dann gar nichts dagegen, einer gegebenen Anordnung die höchste überhaupt mit ihr verträgliche Punktsymmetriegruppe eindeutig zuzuordnen.

Nach diesem Gesichtspunkt haben etwa JAHN und TELLER (6) die meisten der zur Verwirklichung der Punktsymmetriegruppen notwendigen und hinreichenden Punktlagen angegeben. Eine vollständige Zusammenstellung liefert die Tabelle I.

Tabelle I. *Die zur Verwirklichung der Punktsymmetriegruppen notwendigen und hinreichenden Punktlagen*

C_1	$4\,C_1$	D_{qh}	C_1, C_s, C_{2v}
C_i	$3\,C_1$	T	C_1
C_s	$3\,(C_1, C_s)$	T_d	C_1, C_s, C_{3v}
C_q	$2\,C_1$	T_h	C_1, C_s
C_{pi}	C_1	O	C_1
C_{qh}	$2\,(C_1, C_s)$	O_h	$C_1, C_s, C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}$
C_{qv}	$(C_1, C_s) + (C_1, C_s, C_{qv})$	I	C_1
S_m	$2\,C_1$	I_h	$C_1, C_s, C_{2v}, C_{3v}, C_{5v}$
D_q	C_1	$C_{\infty v}$	$2\,C_{\infty v}$
D_{qd}	C_1, C_s	$D_{\infty h}$	$C_{\infty v}$

(C_∞, $C_{\infty h}$, D_∞ haben für endlichzählige Punktlagen keine Bedeutung)

Es bedeuten q eine beliebige ganze Zahl > 1
p eine ungerade Zahl > 1
n eine gerade, nicht durch 4 teilbare Zahl
m eine durch 4 teilbare Zahl

Will man aber die Idealisierung nicht so weit treiben, so wird man zulassen müssen, dass das Verhalten eines Teilchens nicht mehr allgemein der holoedrischen Kugelgruppe gehorcht, sondern irgendeiner durch Art und Zustand des Teilchens bedingten Punktsymmetriegruppe. Diese Eigensymmetrie der Teilchen wirkt nun insofern mit der Lagesymmetrie zusammen, als sie die Symmetriebedingungen der Punktlagen nach oben begrenzt. Bei unbekannter Eigensymmetrie der Teilchen lassen sich daher einer gegebenen Konfiguration — wiederum nach gedanklichem Ersatz der Teilchen durch Punkte — an sich alle überhaupt mit ihr verträglichen Punktsymmetriegruppen als möglich zuordnen. Die sich ergebende Vieldeutigkeit kann offenbar nur durch das Auftreten von Kombinationen verschiedener Punktlagen eingeschränkt werden. Immerhin legt das grundsätzliche Streben nach höchstmöglicher Symmetrie nahe, beim Fehlen von Gegengründen der höchstsymmetrischen Punktgruppe allgemein die grösste Wahrscheinlichkeit beizumessen.

In der Gesamtheit der so für eine Konfiguration in Betracht fallenden Punktsymmetriegruppen lassen sich im allgemeinen zwei Gruppen

auseinanderhalten: in der ersten bedingt die Punktsymmetriegruppe die Lagesymmetrie der Konfiguration notwendig, während diese in der zweiten Gruppe nur bei geeigneter Wahl der Parameter für Punktlagen mit Freiheitsgraden entsteht, also zur blossen Pseudosymmetrie wird. Ein scheinbar aus geometrisch gleichwertigen Teilchen aufgebauter Punktner kann sich dann auch als Kombination von mehreren Punktnern mit entsprechend geringerer Zähligkeit erweisen. In der ersten Gruppe, in der die Konfiguration noch symmetriebedingt ist, stellen nach dem kristallographischen Sprachgebrauch sämtliche Punktlagen allgemeine Formen oder Spezialformen dar, wogegen in der zweiten Gruppe mindestens eine Punktlage eine Grenzform bildet.

Tabelle II gibt nun beispielhaft eine vollständige Übersicht über die symmetriebedingten Konfigurationen von 2 bis 12 Teilchen. Die linke Spalte enthält die Anzahlen gleichwertiger Teilchen, in der mittleren Spalte ist die höchstsymmetrische und in der rechten Spalte sind die weiteren Punktgruppen aufgeführt, aus denen die Konfiguration folgt. Die Konfigurationen selbst sind für jede gegebene Teilchenzahl willkürlich mit Buchstaben bezeichnet. Man sieht, dass gewisse Kombinationen von Zahlen gleichwertiger Teilchen durch die Symmetrielehre ausgeschlossen werden; das ist dann der Fall, wenn es keine Punktsymmetriegruppe gibt, die alle entsprechenden Zähligkeiten zur Verfügung stellen würde.

Sollen auch die pseudosymmetrischen Anordnungen erfasst werden, so müssen die möglichen Übergänge zwischen den einzelnen Konfigurationen, die sich durch Ausnützung der Freiheitsgrade ergeben, berücksichtigt werden. Ein Beispiel mag das veranschaulichen:

Unter den Konfigurationen von 8 gleichwertigen Teilchen kann die oktagonal-prismatische Anordnung a) aus den Punktgruppen b) und c) hervorgehen, die oktagonal-streptoedrische b) aus d), die ditetragonal-prismatische c) aus d) und e), die tetragonal-trapezoedrische d) aus keiner andern, die tetragonal-skalenoedrische e) ebenso aus keiner andern, die tetragonal-bipyramidale f) aus d), e) und g), die orthorhombisch-bipyramidale g) aus keiner andern und schliesslich die oktaedrische h) aus f). Bei mehrfachen Übergängen lässt sich also etwa der oktaedrische Achtpunktner durch die Punktsymmetriegruppen von d), e), f) oder g) vortäuschen. Dabei sind aber immer noch alle 8 Punkte gleichwertig; soll auch diese Voraussetzung fallengelassen werden, so hat man die zusätzlichen Übergänge aus passenden Konfigurationen mit mehreren Punktlagen, deren Zähligkeiten die Summe 8 haben, heranzuziehen.

Tabelle II

Mögliche Punktsymmetriegruppen für Konfigurationen von 2—12 Teilchen

2	a) $C_{\infty v}$ in $D_{\infty h}$	C_∞ in D_∞, C_∞ in $C_{\infty h}$, C_{qv} in D_{qh}, C_{qv} in D_{qd}, C_q in D_q, C_q in C_{qh}, C_p in C_{pi}, $C_{m/2}$ in S_m, C_{2v} in D_{2h}, C_2 in D_2, C_s in C_{2v}, C_s in C_{2h}, C_1 in C_2, C_1 in C_s, C_1 in C_i
1+1	a) $2\,C_{\infty v}$ in $C_{\infty v}$	$2\,C_\infty$ in C_∞, $2\,C_{qv}$ in C_{qv}, $2\,C_q$ in C_q, $2\,C_s$ in C_s, $2\,C_1$ in C_1
3	a) C_{2v} in D_{3h}	C_2 in D_3, C_s in D_{3h}, C_s in C_{3v}, C_1 in C_3
2+1	a) $C_{\infty v}+D_{\infty h}$ in $D_{\infty h}$	$C_\infty+D_\infty$ in D_∞, $C_\infty+C_{\infty h}$ in $C_{\infty h}$, $C_{qv}+D_{qh}$ in D_{qh}, $C_{qv}+D_{qd}$ in D_{qd}, C_q+D_q in D_q, C_q+C_{qh} in C_{qh}, C_p+C_{pi} in C_{pi}, $C_{m/2}+S_m$ in S_m, $C_{2v}+D_{2h}$ in D_{2h}, C_2+D_2 in D_2, C_s+C_{2h} in C_{2h}, C_1+C_i in C_i
	b) C_s+C_{2v} in C_{2v}	C_1+C_s in C_s, C_1+C_2 in C_2
1+1+1	a) $3\,C_{\infty v}$ in $C_{\infty v}$	$3\,C_\infty$ in C_∞, $3\,C_{qv}$ in C_{qv}, $3\,C_q$ in C_q
	b) $3\,C_s$ in C_s	$3\,C_1$ in C_1
4	a) C_{2v} in D_{4h}	C_2 in D_4, C_2 in D_{2d}, C_s in C_{4h}, C_s in C_{4v}, C_1 in C_4
	b) C_s in D_{2d}	C_1 in S_4
	c) C_s in D_{2h}	C_1 in C_{2v}, C_1 in C_{2h}
	d) C_1 in D_2	
	e) C_{3v} in T_d	C_3 in T
3+1	a) $C_{2v}+D_{3h}$ in D_{3h}	C_2+D_3 in D_3, C_s+C_{3h} in C_{3h}
	b) C_s+C_{3v} in C_{3v}	C_1+C_3 in C_3
2+2	a) $2\,C_{\infty v}$ in $D_{\infty h}$	$2\,C_\infty$ in D_∞, $2\,C_\infty$ in $C_{\infty h}$, $2\,C_{qv}$ in D_{qh}, $2\,C_{qv}$ in D_{qd}, $2\,C_q$ in D_q, $2\,C_q$ in C_{qh}, $2\,C_p$ in C_{pi}, $2\,C_{m/2}$ in S_m, $2\,C_{2v}'$ in D_{2h}, $2\,C_2'$ in D_2
	b) $C_{2v}'+C_{2v}''$ in D_{2h}	$C_2'+C_2''$ in D_2, C_s+C_2 in C_{2h}
	c) $2\,C_s'$ in C_{2v}	$2\,C_1$ in C_s
	d) $C_s'+C_s''$ in C_{2v}	
	e) $2\,C_s$ in C_{2h}	$2\,C_1$ in C_i
	f) $2\,C_1$ in C_2	
2+1+1	a) $C_s+2\,C_{2v}$ in C_{2v}	$C_1+2\,C_2$ in C_2
	b) $C_1+2\,C_s$ in C_s	
1+1+1+1	a) $4\,C_{\infty v}$ in $C_{\infty v}$	$4\,C_\infty$ in C_∞, $4\,C_{qv}$ in C_{qv}, $4\,C_q$ in C_q
	b) $4\,C_s$ in C_s	
	c) $4\,C_1$ in C_1	

5	a) C_{2v} in D_{5h}	C_2 in D_5, C_s in C_{5h}, C_s in C_{5v}, C_1 in C_5
4+1	a) $C_{2v}+D_{4h}$ in D_{4h}	C_2+D_4 in D_4, C_2+D_{2d} in D_{2d}, C_s+C_{4h} in C_{4h}
	b) C_s+C_{4v} in C_{4v}	C_1+C_4 in C_4
	c) C_s+D_{2d} in D_{2d}	C_1+S_4 in S_4
	d) C_s+D_{2h} in D_{2h}	C_1+C_{2h} in C_{2h}
	e) C_1+C_{2v} in C_{2v}	
	f) C_1+D_2 in D_2	
	g) $C_{3v}+T_d$ in T_d	C_3+T in T
3+2	a) $C_{2v}+C_{3v}$ in D_{3h}	C_2+C_3 in D_3, C_s+C_3 in C_{3h}
3+1+1	a) $C_s+2\,C_{3v}$ in C_{3v}	$C_1+2\,C_3$ in C_3
2+2+1	a) $2\,C_{\infty v}+D_{\infty h}$ in $D_{\infty h}$	$2\,C_\infty+D_\infty$ in D_∞, $2\,C_\infty+C_{\infty h}$ in $C_{\infty h}$, $2\,C_{qv}+D_{qh}$ in D_{qh}, $2\,C_{qv}+D_{qd}$ in D_{qd}, $2\,C_q+D_q$ in D_q, $2\,C_q+C_{qh}$ in C_{qh}, $2\,C_p+C_{pi}$ in C_{pi}, $2\,C_{m/2}+S_m$ in S_m, $2\,C_{2v}'+D_{2h}$ in D_{2h}, $2\,C_2'+D_2$ in D_2
	b) $C_{2v}'+C_{2v}''+D_{2h}$ in D_{2h}	$C_2'+C_2''+D_2$ in D_2, $C_s+C_2+C_{2h}$ in C_{2h}
	c) $2\,C_s'+C_{2v}$ in C_{2v}	
	d) $C_s'+C_s''+C_{2v}$ in C_{2v}	
	e) $2\,C_s+C_{2h}$ in C_{2h}	$2\,C_1+C_i$ in C_i
	f) $2\,C_1+C_s$ in C_s	
	g) $2\,C_1+C_2$ in C_2	
2+1+1+1	a) $C_s+3\,C_{2v}$ in C_{2v}	$C_1+3\,C_2$ in C_2
	b) $C_1+3\,C_s$ in C_s	
1+1+1+1+1	a) $5\,C_{\infty v}$ in $C_{\infty v}$	$5\,C_\infty$ in C_∞, $5\,C_{qv}$ in C_{qv}, $5\,C_q$ in C_q
	b) $5\,C_s$ in C_s	
	c) $5\,C_1$ in C_1	
6	a) C_{2v} in D_{6h}	C_2 in D_6, C_2 in D_{3d}, C_s in C_{6h}, C_s in C_{6v}, C_1 in C_6
	b) C_s in D_{3d}	C_1 in C_{3i}
	c) $C_s^{\perp}$ in D_{3h}	C_1 in C_{3v}
	d) C_1 in D_3	
	e) $C_s^{\parallel}$ in D_{3h}	C_1 in C_{3h}
	f) C_{4v} in O_h	C_4 in O, C_{2v} in T_h, C_{2v} in T_d, C_2 in T
5+1	a) $C_{2v}+D_{5h}$ in D_{5h}	C_2+D_5 in D_5, C_s+C_{5h} in C_{5h}
	b) C_s+C_{5v} in C_{5v}	C_1+C_5 in C_5
4+2	a) $C_{2v}+C_{4v}$ in D_{4h}	C_2+C_4 in D_4, C_2+C_{2v} in D_{2d}, C_s+C_4 in C_{4h}

	b) $C_s + C_{2v}$ in D_{2d}	$C_1 + C_2$ in S_4
	c) $C_s + C_{2v}^{\perp}$ in D_{2h}	
	d) $C_s + C_{2v}^{\parallel}$ in D_{2h}	$C_1 + C_2$ in C_{2h}
	e) $C_1 + C_s$ in C_{2v}	
	f) $C_1 + C_s$ in C_{2h}	
	g) $C_1 + C_2$ in D_2	
4+1+1	a) $C_s + 2\,C_{4v}$ in C_{4v}	$C_1 + 2\,C_4$ in C_4
	b) $C_1 + 2\,C_{2v}$ in C_{2v}	
3+3	a) $2\,C_{2v}'$ in D_{3h}	$2\,C_2'$ in D_3
	b) $C_{2v}' + C_{2v}''$ in D_{3h}	$C_2' + C_2''$ in D_3
	c) $2\,C_s$ in C_{3h}	
	d) $2\,C_s'$ in C_{3v}	
	e) $C_s' + C_s''$ in C_{3v}	
	f) $2\,C_1$ in C_3	
3+2+1	a) $C_{2v} + C_{3v} + D_{3h}$ in D_{3h}	$C_2 + C_3 + D_3$ in D_3, $C_s + C_3 + C_{3h}$ in C_{3h}
3+1+1+1	a) $C_s + 3\,C_{3v}$ in C_{3v}	$C_1 + 3\,C_3$ in C_3
2+2+2	a) $3\,C_{\infty v}$ in $D_{\infty h}$	$3\,C_\infty$ in D_∞, $3\,C_\infty$ in $C_{\infty h}$, $3\,C_{qv}$ in D_{qh}, $3\,C_{qv}$ in D_{qd}, $3\,C_q$ in D_q, $3\,C_q$ in C_{qh}, $3\,C_p$ in C_{pi}, $3\,C_{m/2}$ in S_m, $3\,C_{2v}'$ in D_{2h}, $3\,C_2'$ in D_2
	b) $C_{2v}' + C_{2v}'' + C_{2v}'''$ in D_{2h}	$C_2' + C_2'' + C_2'''$ in D_2
	c) $2\,C_s + C_2$ in C_{2h}	
	d) $2\,C_{2v}' + C_{2v}''$ in D_{2h}	$2\,C_2' + C_2''$ in D_2, $C_s + 2\,C_2$ in C_{2h}
	e) $2\,C_s' + C_s''$ in C_{2v}	
	f) $3\,C_s'$ in C_{2v}	
	g) $3\,C_1$ in C_s	
	h) $3\,C_s$ in C_{2h}	
	i) $3\,C_1$ in C_i	
	k) $3\,C_1$ in C_2	
2+2+1+1	a) $2\,C_s' + 2\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	b) $C_s' + C_s'' + 2\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	c) $2\,C_1 + 2\,C_2$ in C_2	
	d) $2\,C_1 + 2\,C_s$ in C_s	
2+1+1+1+1	a) $C_s + 4\,C_{2v}$ in C_{2v}	$C_1 + 4\,C_2$ in C_2
	b) $C_1 + 4\,C_s$ in C_s	
1+1+1+1+1+1	a) $6\,C_{\infty v}$ in $C_{\infty v}$	$6\,C_\infty$ in C_∞, $6\,C_{qv}$ in C_{qv}, $6\,C_q$ in C_q
	b) $6\,C_s$ in C_s	
	c) $6\,C_1$ in C_1	

7	a) C_{2v} in D_{7h}	C_2 in D_7, C_s in C_{7h}, C_s in C_{7v}, C_1 in C_7
6+1	a) $C_{2v}+D_{6h}$ in D_{6h}	C_2+D_6 in D_6, C_2+D_{3d} in D_{3d}, C_s+C_{6h} in C_{6h}
	b) C_s+C_{6v} in C_{6v}	C_1+C_6 in C_6
	c) C_s+D_{3d} in D_{3d}	C_1+C_{3i} in C_{3i}
	d) $C_s^{\perp}+D_{3h}$ in D_{3h}	
	e) C_1+C_{3v} in C_{3v}	
	f) C_1+D_3 in D_3	
	g) $C_s^{\parallel}+D_{3h}$ in D_{3h}	C_1+C_{3h} in C_{3h}
	h) $C_{4v}+O_h$ in O_h	C_4+O in O, $C_{2v}+T_h$ in T_h, $C_{2v}+T_d$ in T_d, C_2+T in T
5+2	a) $C_{2v}+C_{5v}$ in D_{5h}	C_2+C_5 in D_5, C_s+C_5 in C_{5h}
5+1+1	a) $C_s+2\,C_{5v}$ in C_{5v}	$C_1+2\,C_5$ in C_5
4+3	—	
4+2+1	a) $C_{2v}+C_{4v}+D_{4h}$ in D_{4h}	$C_2+C_4+D_4$ in D_4, $C_2+C_{2v}+D_{2d}$ in D_{2d}, $C_s+C_4+C_{4h}$ in C_{4h}
	b) $C_s+C_{2v}+D_{2d}$ in D_{2d}	$C_1+C_2+S_4$ in S_4
	c) $C_s+C_{2v}^{\perp}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	d) $C_s+C_{2v}^{\parallel}+D_{2h}$ in D_{2h}	$C_1+C_2+C_{2h}$ in C_{2h}
	e) $C_1+C_s+C_{2v}$ in C_{2v}	
	f) $C_1+C_s+C_{2h}$ in C_{2h}	
	g) $C_1+C_2+D_2$ in D_2	
4+1+1+1	a) $C_s+3\,C_{4v}$ in C_{4v}	$C_1+3\,C_4$ in C_4
	b) $C_1+3\,C_{2v}$ in C_{2v}	
3+3+1	a) $2\,C_{2v}'+D_{3h}$ in D_{3h}	$2\,C_2'+D_3$ in D_3
	b) $C_{2v}'+C_{2v}''+D_{3h}$ in D_{3h}	$C_2'+C_2''+D_3$ in D_3
	c) $2\,C_s+C_{3h}$ in C_{3h}	
	d) $2\,C_s'+C_{3v}$ in C_{3v}	
	e) $C_s'+C_s''+C_{3v}$ in C_{3v}	
	f) $2\,C_1+C_3$ in C_3	
3+2+2	a) $C_{2v}+2\,C_{3v}$ in D_{3h}	$C_2+2\,C_3$ in D_3, $C_s+2\,C_3$ in C_{3h}
3+2+1+1	—	
3+1+1+1+1	a) $C_s+4\,C_{3v}$ in C_{3v}	$C_1+4\,C_3$ in C_3
2+2+2+1	a) $3\,C_{\infty v}+D_{\infty h}$ in $D_{\infty h}$	$3\,C_\infty+D_\infty$ in D_∞, $3\,C_\infty+C_{\infty h}$ in $C_{\infty h}$, $3\,C_{qv}+D_{qh}$ in D_{qh}, $3\,C_{qv}+D_{qd}$ in D_{qd}, $3\,C_q+D_q$ in D_q, $3\,C_q+C_{qh}$ in C_{qh}, $3\,C_p+C_{pi}$ in C_{pi}, $3\,C_{m/2}+S_m$ in S_m, $3\,C_{2v}'+D_{2h}$ in D_{2h}, $3\,C_2'+D_2$ in D_2

	b) $C_{2v}' + C_{2v}'' + C_{2v}''' + D_{2h}$ in D_{2h}	$C_2' + C_2'' + C_2''' + D_2$ in D_2
	c) $2\,C_s + C_2 + C_{2h}$ in C_{2h}	
	d) $2\,C_{2v}' + C_{2v}'' + D_{2h}$ in D_{2h}	$2\,C_2' + C_2'' + D_2$ in D_2, $C_s + 2\,C_2 + C_{2h}$ in C_{2h}
	e) $2\,C_s' + C_s'' + C_{2v}$ in C_{2v}	
	f) $3\,C_s' + C_{2v}$ in C_{2v}	
	g) $3\,C_1 + C_s$ in C_s	
	h) $3\,C_s + C_{2h}$ in C_{2h}	
	i) $3\,C_1 + C_i$ in C_i	
	k) $3\,C_1 + C_2$ in C_2	
2+2+1+1+1	a) $2\,C_s' + 3\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	b) $C_s' + C_s'' + 3\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	c) $2\,C_1 + 3\,C_2$ in C_2	
	d) $2\,C_1 + 3\,C_s$ in C_s	
2+1+1+1+1+1	a) $C_s + 5\,C_{2v}$ in C_{2v}	$C_1 + 5\,C_2$ in C_2
	b) $C_1 + 5\,C_s$ in C_s	
1+1+1+1+1+1+1	a) $7\,C_{\infty v}$ in $C_{\infty v}$	$7\,C_\infty$ in C_∞, $7\,C_{qv}$ in C_{qv}, $7\,C_q$ in C_q
	b) $7\,C_s$ in C_s	
	c) $7\,C_1$ in C_1	
8	a) C_{2v} in D_{8h}	C_2 in D_8, C_2 in D_{4d}, C_s in C_{8h}, C_s in C_{8v}, C_1 in C_8
	b) C_s in D_{4d}	C_1 in S_8
	c) $C_s^{\perp}$ in D_{4h}	C_1 in C_{4v}
	d) C_1 in D_4	
	e) C_1 in D_{2d}	
	f) $C_s^{\parallel}$ in D_{4h}	C_1 in C_{4h}
	g) C_1 in D_{2h}	
	h) C_{3v} in O_h	C_3 in O, C_3 in T_h
7+1	a) $C_{2v} + D_{7h}$ in D_{7h}	$C_2 + D_7$ in D_7, $C_s + C_{7h}$ in C_{7h}
	b) $C_s + C_{7v}$ in C_{7v}	$C_1 + C_7$ in C_7
6+2	a) $C_{2v} + C_{6v}$ in D_{6h}	$C_2 + C_6$ in D_6, $C_2 + C_{3v}$ in D_{3d}, $C_s + C_6$ in C_{6h}
	b) $C_s + C_{3v}$ in D_{3d}	$C_1 + C_3$ in C_{3i}
	c) $C_s^{\perp} + C_{3v}$ in D_{3h}	
	d) $C_1 + C_3$ in D_3	
	e) $C_s^{\parallel} + C_{3v}$ in D_{3h}	$C_1 + C_3$ in C_{3h}
6+1+1	a) $C_s + 2\,C_{6v}$ in C_{6v}	$C_1 + 2\,C_6$ in C_6
	b) $C_1 + 2\,C_{3v}$ in C_{3v}	
5+3	—	

5+2+1	a) $C_{2v}+C_{5v}+D_{5h}$ in D_{5h}	$C_2+C_5+D_5$ in D_5, $C_s+C_5+C_{5h}$ in C_{5h}
5+1+1+1	a) $C_s+3\,C_{5v}$ in C_{5v}	$C_1+3\,C_5$ in C_5
4+4	a) $2\,C_{2v}'$ in D_{4h}	$2\,C_2'$ in D_4, $2\,C_2$ in D_{2d}
	b) $2\,C_s'$ in C_{4v}	
	c) $C_{2v}'+C_{2v}''$ in D_{4h}	$C_2'+C_2''$ in D_4
	d) $C_s'+C_s''$ in C_{4v}	
	e) $2\,C_s$ in C_{4h}	
	f) $2\,C_1$ in C_4	
	g) C_2+C_s in D_{2d}	
	h) $2\,C_s$ in D_{2d}	
	i) $2\,C_1$ in S_4	
	k) $2\,C_s'$ in D_{2h}	
	l) $2\,C_1$ in C_{2v}	
	m) $C_s'+C_s''$ in D_{2h}	
	n) $2\,C_1$ in C_{2h}	
	o) $2\,C_1$ in D_2	
	p) $2\,C_{3v}$ in T_d	$2\,C_3$ in T
	q) $C_{3v}+C_{3v}'$ in T_d	C_3+C_3' in T
4+3+1	—	
4+2+2	a) $C_{2v}+2\,C_{4v}$ in D_{4h}	$C_2+2\,C_4$ in D_4, $C_2+2\,C_{2v}$ in D_{2d}, $C_s+2\,C_4$ in C_{4h}
	b) $C_s+2\,C_{2v}$ in D_{2d}	$C_1+2\,C_2$ in S_4
	c) $C_s+2\,C_{2v}^{\perp}$ in D_{2h}	
	d) $C_s+C_{2v}^{\perp}+C_{2v}^{\parallel}$ in D_{2h}	
	e) $C_s+2\,C_{2v}^{\parallel}$ in D_{2h}	$C_1+2\,C_2$ in C_{2h}
	f) $C_s+C_{2v}^{\parallel}+C_{2v}^{\parallel\prime}$ in D_{2h}	
	g) $C_1+2\,C_s'$ in C_{2v}	
	h) $C_1+C_s'+C_s''$ in C_{2v}	
	i) $C_1+C_2+C_s$ in C_{2h}	
	k) $C_1+2\,C_s$ in C_{2h}	
	l) $C_1+2\,C_2'$ in D_2	
	m) $C_1+C_2'+C_2''$ in D_2	
4+2+1+1	a) $C_1+C_s+2\,C_{2v}$ in C_{2v}	
4+1+1+ 1+1	a) $C_s+4\,C_{4v}$ in C_{4v}	$C_1+4\,C_4$ in C_4
	b) $C_1+4\,C_{2v}$ in C_{2v}	
3+3+2	a) $2\,C_{2v}'+C_{3v}$ in D_{3h}	$2\,C_2'+C_3$ in D_3
	b) $C_{2v}'+C_{2v}''+C_{3v}$ in D_{3h}	$C_2'+C_2''+C_3$ in D_3
	c) $2\,C_s+C_3$ in C_{3h}	
3+3+1+1	a) $2\,C_s'+2\,C_{3v}$ in C_{3v}	
	b) $C_s'+C_s''+2\,C_{3v}$ in C_{3v}	
	c) $2\,C_1+2\,C_3$ in C_3	

3+2+2+1	a) $C_{2v}+2\,C_{3v}+D_{3h}$ in D_{3h}	$C_2+2\,C_3+D_3$ in D_3, $C_s+2\,C_3+C_{3h}$ in C_{3h}
3+2+1+1+1	—	
3+1+1+1+1+1	a) $C_s+5\,C_{3v}$ in C_{3v}	$C_1+5\,C_3$ in C_3
2+2+2+2	a) $4\,C_{\infty v}$ in $D_{\infty h}$	$4\,C_\infty$ in D_∞, $4\,C_\infty$ in $C_{\infty h}$, $4\,C_{qv}$ in D_{qh}, $4\,C_{qv}$ in D_{qd}, $4\,C_q$ in D_q, $4\,C_q$ in C_{qh}, $4\,C_p$ in C_{pi}, $4\,C_{m/2}$ in S_m, $4\,C_{2v}'$ in D_{2h}, $4\,C_2'$ in D_2
	b) $2C_{2v}'+C_{2v}''+C_{2v}'''$ in D_{2h}	$2\,C_2'+C_2''+C_2'''$ in D_2
	c) $2\,C_s+2\,C_2$ in C_{2h}	
	d) $3\,C_s+C_2$ in C_{2h}	
	e) $2\,C_{2v}'+2\,C_{2v}''$ in D_{2h}	$2\,C_2'+2\,C_2''$ in D_2
	f) $3\,C_{2v}'+C_{2v}''$ in D_{2h}	$3\,C_2'+C_2''$ in D_2, $3\,C_2+C_s$ in C_{2h}
	g) $2\,C_s'+2\,C_s''$ in C_{2v}	
	h) $3\,C_s'+C_s''$ in C_{2v}	
	i) $4\,C_s'$ in C_{2v}	
	k) $4\,C_1$ in C_s	
	l) $4\,C_s$ in C_{2h}	
	m) $4\,C_1$ in C_i	
	n) $4\,C_1$ in C_2	
2+2+2+1+1	a) $2\,C_s'+C_s''+2\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	b) $3\,C_s'+2\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	c) $3\,C_1+2\,C_s$ in C_s	
	d) $3\,C_1+2\,C_2$ in C_2	
2+2+1+1+1+1	a) $2\,C_s'+4\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	b) $C_s'+C_s''+4\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	c) $2\,C_1+4\,C_2$ in C_2	
	d) $2\,C_1+4\,C_s$ in C_s	
2+1+1+1+1+1+1	a) $C_s+6\,C_{2v}$ in C_{2v}	$C_1+6\,C_2$ in C_2
	b) $C_1+6\,C_s$ in C_s	
1+1+1+1+1+1+1+1	a) $8\,C_{\infty v}$ in $C_{\infty v}$	$8\,C_\infty$ in C_∞, $8\,C_{qv}$ in C_{qv}, $8\,C_q$ in C_q
	b) $8\,C_s$ in C_s	
	c) $8\,C_1$ in C_1	
9	a) C_{2v} in D_{9h}	C_2 in D_9, C_s in C_{9h}, C_s in C_{9v}, C_1 in C_9
8+1	a) $C_{2v}+D_{8h}$ in D_{8h}	C_2+D_8 in D_8, C_2+D_{4d} in D_{4d}, C_s+C_{8h} in C_{8h}
	b) C_s+C_{8v} in C_{8v}	C_1+C_8 in C_8
	c) C_s+D_{4d} in D_{4d}	C_1+S_8 in S_8

	d) $C_s^{\perp} + D_{4h}$ in D_{4h}	
	e) $C_1 + C_{4v}$ in C_{4v}	
	f) $C_1 + D_4$ in D_4	
	g) $C_1 + D_{2d}$ in D_{2d}	
	h) $C_s^{\parallel} + D_{4h}$ in D_{4h}	$C_1 + C_{4h}$ in C_{4h}
	i) $C_1 + D_{2h}$ in D_{2h}	
	k) $C_{3v} + O_h$ in O_h	$C_3 + O$ in O, $C_3 + T_h$ in T_h
7+2	a) $C_{2v} + C_{7v}$ in D_{7h}	$C_2 + C_7$ in D_7, $C_s + C_7$ in C_{7h}
7+1+1	a) $C_s + 2\,C_{7v}$ in C_{7v}	$C_1 + 2\,C_7$ in C_7
6+3	a) $C_s^{\perp} + C_{2v}$ in D_{3h}	
	b) $C_s^{\parallel} + C_{2v}^{\parallel}$ in D_{3h}	
	c) $C_s^{\parallel} + C_{2v}^{\perp}$ in D_{3h}	
	d) $C_1 + C_s$ in C_{3h}	
	e) $C_1 + C_2$ in D_3	
	f) $C_1 + C_s$ in C_{3v}	
6+2+1	a) $C_{2v} + C_{6v} + D_{6h}$ in D_{6h}	$C_2 + C_6 + D_6$ in D_6, $C_2 + C_{3v} + D_{3d}$ in D_{3d}, $C_s + C_6 + C_{6h}$ in C_{6h}
	b) $C_s + C_{3v} + D_{3d}$ in D_{3d}	$C_1 + C_3 + C_{3i}$ in C_{3i}
	c) $C_s^{\perp} + C_{3v} + D_{3h}$ in D_{3h}	
	d) $C_1 + C_3 + D_3$ in D_3	
	e) $C_s^{\parallel} + C_{3v} + D_{3h}$ in D_{3h}	$C_1 + C_3 + C_{3h}$ in C_{3h}
6+1+1+1	a) $C_s + 3\,C_{6v}$ in C_{6v}	$C_1 + 3\,C_6$ in C_6
	b) $C_1 + 3\,C_{3v}$ in C_{3v}	
5+4	—	
5+3+1	—	
5+2+2	a) $C_{2v} + 2\,C_{5v}$ in D_{5h}	$C_2 + 2\,C_5$ in D_5, $C_s + 2\,C_5$ in C_{5h}
5+2+1+1	—	
5+1+1+1+1	a) $C_s + 4\,C_{5v}$ in C_{5v}	$C_1 + 4\,C_5$ in C_5
4+4+1	a) $2\,C_{2v}' + D_{4h}$ in D_{4h}	$2\,C_2' + D_4$ in D_4, $2\,C_2 + D_{2d}$ in D_{2d}
	b) $2\,C_s' + C_{4v}$ in C_{4v}	
	c) $C_{2v}' + C_{2v}'' + D_{4h}$ in D_{4h}	$C_2' + C_2'' + D_4$ in D_4
	d) $C_s' + C_s'' + C_{4v}$ in C_{4v}	
	e) $2\,C_s + C_{4h}$ in C_{4h}	
	f) $2\,C_1 + C_4$ in C_4	
	g) $C_2 + C_s + D_{2d}$ in D_{2d}	
	h) $2\,C_s + D_{2d}$ in D_{2d}	
	i) $2\,C_1 + S_4$ in S_4	
	k) $2\,C_s' + D_{2h}$ in D_{2h}	
	l) $2\,C_1 + C_{2v}$ in C_{2v}	
	m) $C_s' + C_s'' + D_{2h}$ in D_{2h}	

	n) $2\,C_1+C_{2h}$ in C_{2h}	
	o) $2\,C_1+D_2$ in D_2	
	p) $2\,C_{3v}+T_d$ in T_d	$2\,C_3+T$ in T
	q) $C_{3v}+C_{3v}'+T_d$ in T_d	$C_3+C_3'+T$ in T
4+3+2	—	
4+3+1+1	—	
4+2+2+1	a) $C_{2v}+2\,C_{4v}+D_{4h}$ in D_{4h}	$C_2+2\,C_4+D_4$ in D_4, $C_2+2\,C_{2v}+D_{2d}$ in D_{2d}, $C_s+2\,C_4+C_{4h}$ in C_{4h}
	b) $C_s+2\,C_{2v}+D_{2d}$ in D_{2d}	$C_1+2\,C_2+S_4$ in S_4
	c) $C_s+2\,C_{2v}^{\perp}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	d) $C_s+C_{2v}^{\perp}+C_{2v}^{\parallel}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	e) $C_s+2\,C_{2v}^{\parallel\prime}+D_{2h}$ in D_{2h}	$C_1+2\,C_2+C_{2h}$ in C_{2h}
	f) $C_s+C_{2v}^{\parallel\prime}+C_{2v}^{\parallel\prime\prime}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	g) $C_1+2\,C_s'+C_{2v}$ in C_{2v}	
	h) $C_1+C_s'+C_s''+C_{2v}$ in C_{2v}	
	i) $C_1+C_2+C_s+C_{2h}$ in C_{2h}	
	k) $C_1+2\,C_s+C_{2h}$ in C_{2h}	
	l) $C_1+2\,C_2'+D_2$ in D_2	
	m) $C_1+C_2'+C_2''+D_2$ in D_2	
4+2+1+1+1	a) $C_1+C_s+3\,C_{2v}$ in C_{2v}	
4+1+1+1+1+1	a) $C_s+5\,C_{4v}$ in C_{4v}	$C_1+5\,C_4$ in C_4
	b) $C_1+5\,C_{2v}$ in C_{2v}	
3+3+3	a) $3\,C_{2v}'$ in D_{3h}	$3\,C_2'$ in D_3
	b) $2\,C_{2v}'+C_{2v}''$ in D_{3h}	$2\,C_2'+C_2''$ in D_3
	c) $3\,C_s$ in C_{3h}	
	d) $3\,C_s'$ in C_{3v}	
	e) $2\,C_s'+C_s''$ in C_{3v}	
	f) $3\,C_1$ in C_3	
3+3+2+1	a) $2C_{2v}'+C_{3v}+D_{3h}$ in D_{3h}	$2\,C_2'+C_3+D_3$ in D_3
	b) $C_{2v}'+C_{2v}''+C_{3v}+D_{3h}$ in D_{3h}	$C_2'+C_2''+C_3+D_3$ in D_3
	c) $2\,C_s+C_3+C_{3h}$ in C_{3h}	
3+3+1+1+1	a) $2\,C_s'+3\,C_{3v}$ in C_{3v}	
	b) $C_s'+C_s''+3\,C_{3v}$ in C_{3v}	
	c) $2\,C_1+3\,C_3$ in C_3	
3+2+2+2	a) $C_{2v}+3\,C_{3v}$ in D_{3h}	$C_2+3\,C_3$ in D_3, $C_s+3\,C_3$ in C_{3h}
3+2+2+1+1	—	
3+2+1+1+1+1	—	

3+1+1+1+ 1+1+1	a) $C_s + 6\,C_{3v}$ in C_{3v}	$C_1 + 6\,C_3$ in C_3
2+2+2+ 2+1	a) $4\,C_{\infty v} + D_{\infty h}$ in $D_{\infty h}$	$4\,C_\infty + D_\infty$ in D_∞, $4\,C_\infty + C_{\infty h}$ in $C_{\infty h}$, $4\,C_{qv} + D_{qh}$ in D_{qh}, $4\,C_{qv} + D_{qd}$ in D_{qd}, $4\,C_q + D_q$ in D_q, $4\,C_q + C_{qh}$ in C_{qh}, $4\,C_p + C_{pi}$ in C_{pi}, $4\,C_{m/2} + S_m$ in S_m, $4\,C_{2v}' + D_{2h}$ in D_{2h}, $4\,C_2' + D_2$ in D_2
	b) $2C_{2v}' + C_{2v}'' + C_{2v}''' + D_{2h}$ in D_{2h}	$2\,C_2' + C_2'' + C_2''' + D_2$ in D_2
	c) $2\,C_s + 2\,C_2 + C_{2h}$ in C_{2h}	
	d) $3\,C_s + C_2 + C_{2h}$ in C_{2h}	
	e) $2\,C_{2v}' + 2\,C_{2v}'' + D_{2h}$ in D_{2h}	$2\,C_2' + 2\,C_2'' + D_2$ in D_2
	f) $3C_{2v}' + C_{2v}'' + D_{2h}$ in D_{2h}	$3\,C_2' + C_2'' + D_2$ in D_2, $3\,C_2 + C_s + C_{2h}$ in C_{2h}
	g) $2\,C_s' + 2\,C_s'' + C_{2v}$ in C_{2v}	
	h) $3\,C_s' + C_s'' + C_{2v}$ in C_{2v}	
	i) $4\,C_s' + C_{2v}$ in C_{2v}	
	k) $4\,C_1 + C_s$ in C_s	
	l) $4\,C_s + C_{2h}$ in C_{2h}	
	m) $4\,C_1 + C_i$ in C_i	
	n) $4\,C_1 + C_2$ in C_2	
2+2+2+1+ 1+1	a) $2\,C_s' + C_s'' + 3\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	b) $3\,C_s' + 3\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	c) $3\,C_1 + 3\,C_s$ in C_s	
	d) $3\,C_1 + 3\,C_2$ in C_2	
2+2+1+1+ 1+1+1	a) $2\,C_s' + 5\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	b) $C_s' + C_s'' + 5\,C_{2v}$ in C_{2v}	
	c) $2\,C_1 + 5\,C_2$ in C_2	
	d) $2\,C_1 + 5\,C_s$ in C_s	
2+1+1+1+ 1+1+1+1	a) $C_s + 7\,C_{2v}$ in C_{2v}	$C_1 + 7\,C_2$ in C_2
	b) $C_1 + 7\,C_s$ in C_s	
1+1+1+ 1+1+1+ 1+1+1	a) $9\,C_{\infty v}$ in $C_{\infty v}$	$9\,C_\infty$ in C_∞, $9\,C_{qv}$ in C_{qv}, $9\,C_q$ in C_q
	b) $9\,C_s$ in C_s	
	c) $9\,C_1$ in C_1	
10	a) C_{2v} in D_{10h}	C_2 in D_{10}, C_2 in D_{5d}, C_s in C_{10h}, C_s in C_{10v}, C_1 in C_{10}
	b) C_s in D_{5d}	C_1 in C_{5i}
	c) $C_s^{\perp}$ in D_{5h}	C_1 in C_{5v}
	d) C_1 in D_5	
	e) $C_s^{\parallel}$ in D_{5h}	C_1 in C_{5h}

9+1	a) $C_{2v}+D_{9h}$ in D_{9h} b) C_s+C_{9v} in C_{9v}	C_2+D_9 in D_9, C_s+C_{9h} in C_{9h} C_1+C_9 in C_9
8+2	a) $C_{2v}+C_{8v}$ in D_{8h} b) C_s+C_{4v} in D_{4d} c) $C_s^{\perp}+C_{4v}$ in D_{4h} d) C_1+C_4 in D_4 e) C_1+C_{2v} in D_{2d} f) $C_s^{\parallel}+C_{4v}$ in D_{4h} g) C_1+C_{2v} in D_{2h}	C_2+C_8 in D_8, C_2+C_{4v} in D_{4d}, C_s+C_8 in C_{8h} C_1+C_4 in S_8 C_1+C_4 in C_{4h}
8+1+1	a) $C_s+2\,C_{8v}$ in C_{8v} b) $C_1+2\,C_{4v}$ in C_{4v}	$C_1+2\,C_8$ in C_8
7+3	—	
7+2+1	a) $C_{2v}+C_{7v}+D_{7h}$ in D_{7h}	$C_2+C_7+D_7$ in D_7, $C_s+C_7+C_{7h}$ in C_{7h}
7+1+1+1	a) $C_s+3\,C_{7v}$ in C_{7v}	$C_1+3\,C_7$ in C_7
6+4	a) $C_{2v}+C_{3v}$ in T_d	C_2+C_3 in T
6+3+1	a) $C_s^{\perp}+C_{2v}+D_{3h}$ in D_{3h} b) $C_s^{\parallel}+C_{2v}^{\parallel}+D_{3h}$ in D_{3h} c) $C_s^{\parallel}+C_{2v}^{\perp}+D_{3h}$ in D_{3h} d) $C_1+C_s+C_{3h}$ in C_{3h} e) $C_1+C_2+D_3$ in D_3 f) $C_1+C_s+C_{3v}$ in C_{3v}	
6+2+2	a) $C_{2v}+2\,C_{6v}$ in D_{6h} b) $C_s+2\,C_{3v}$ in D_{3d} c) $C_s^{\perp}+2\,C_{3v}$ in D_{3h} d) $C_1+2\,C_3$ in D_3 e) $C_s^{\parallel}+2\,C_{3v}$ in D_{3h}	$C_2+2\,C_6$ in D_6, $C_2+2\,C_{3v}$ in D_{3d}, $C_s+2\,C_6$ in C_{6h} $C_1+2\,C_3$ in C_{3i} $C_1+2\,C_3$ in C_{3h}
6+2+1+1	—	
6+1+1+1+1	a) $C_s+4\,C_{6v}$ in C_{6v} b) $C_1+4\,C_{3v}$ in C_{3v}	$C_1+4\,C_6$ in C_6
5+5	a) $2\,C_{2v}'$ in D_{5h} b) $C_{2v}'+C_{2v}''$ in D_{5h} c) $2\,C_s$ in C_{5h} d) $2\,C_s'$ in C_{5v} e) $C_s'+C_s''$ in C_{5v} f) $2\,C_1$ in C_5	$2\,C_2'$ in D_5 $C_2'+C_2''$ in D_5
5+4+1	—	
5+3+2	—	

5+3+1+1	—	
5+2+2+1	a) $C_{2v}+2\,C_{5v}+D_{5h}$ in D_{5h}	$C_2+2\,C_5+D_5$ in D_5, $C_s+2\,C_5+C_{5h}$ in C_{5h}
5+2+1+1+1	—	
5+1+1+1+1+1	a) $C_s+5\,C_{5v}$ in C_{5v}	$C_1+5\,C_5$ in C_5
4+4+2	a) $2\,C_{2v}'+C_{4v}$ in D_{4h} b) $C_{2v}'+C_{2v}''+C_{4v}$ in D_{4h} c) $2\,C_s+C_4$ in C_{4h} d) $C_2+C_s+C_{2v}$ in D_{2d} e) $2\,C_s+C_{2v}$ in D_{2d} f) $2\,C_1+C_2$ in S_4 g) $2\,C_s'+C_{2v}^{\perp}$ in D_{2h} h) $2\,C_s'+C_{2v}^{\parallel}$ in D_{2h} i) $C_s'+C_s''+C_{2v}^{\parallel}$ in D_{2h} k) $C_s'+C_s''+C_{2v}^{\perp,\parallel}$ in D_{2h} l) $2\,C_1+C_2$ in C_{2h} m) $2\,C_1+C_s$ in C_{2h} n) $2\,C_1+C_s$ in C_{2v} o) $2\,C_1+C_2$ in D_2	$2\,C_2'+C_4$ in D_4, $2\,C_2+C_{2v}$ in D_{2d} $C_2'+C_2''+C_4$ in D_4
4+4+1+1	a) $2\,C_s'+2\,C_{4v}$ in C_{4v} b) $C_s'+C_s''+2\,C_{4v}$ in C_{4v} c) $2\,C_1+2\,C_4$ in C_4 d) $2\,C_1+2\,C_{2v}$ in C_{2v}	
4+3+3	—	
4+3+2+1	—	
4+3+1+1+1	—	
4+2+2+2	a) $C_{2v}+3\,C_{4v}$ in D_{4h} b) $C_s+3\,C_{2v}$ in D_{2d} c) $C_s+3\,C_{2v}^{\perp}$ in D_{2h} d) $C_s+2\,C_{2v}^{\perp}+C_{2v}^{\parallel}$ in D_{2h} e) $C_s+C_{2v}^{\perp}+2\,C_{2v}^{\parallel}$ in D_{2h} f) $C_s+3\,C_{2v}^{\parallel}$ in D_{2h} g) $C_s+C_{2v}^{\perp}+C_{2v}^{\parallel\prime}+C_{2v}^{\parallel\prime\prime}$ in D_{2h} h) $C_s+2\,C_{2v}^{\parallel\prime}+C_{2v}^{\parallel\prime\prime}$ in D_{2h} i) $C_1+3\,C_s'$ in C_{2v} k) $C_1+2\,C_s'+C_s''$ in C_{2v} l) $C_1+3\,C_s$ in C_{2h} m) $C_1+C_2+2\,C_s$ in C_{2h} n) $C_1+2\,C_2+C_s$ in C_{2h}	$C_2+3\,C_4$ in D_4, $C_2+3\,C_{2v}$ in D_{2d}, $C_s+3\,C_4$ in C_{4h} $C_1+3\,C_2$ in S_4 $C_1+3\,C_2$ in C_{2h}

	o) $C_1+3\,C_2'$ in D_2 p) $C_1+2\,C_2'+C_2''$ in D_2 q) $C_1+C_2'+C_2''+C_2'''$ in D_2	
4+2+2+1+1	a) $C_1+2\,C_s'+2\,C_{2v}$ in C_{2v} b) $C_1+C_s'+C_s''+2\,C_{2v}$ in C_{2v}	
4+2+1+1+1+1	a) $C_1+C_s+4\,C_{2v}$ in C_{2v}	
4+1+1+1+1+1+1	a) $C_s+6\,C_{4v}$ in C_{4v} b) $C_1+6\,C_{2v}$ in C_{2v}	$C_1+6\,C_4$ in C_4
3+3+3+1	a) $3\,C_{2v}'+D_{3h}$ in D_{3h} b) $2C_{2v}'+C_{2v}''+D_{3h}$ in D_{3h} c) $3\,C_s+C_{3h}$ in C_{3h} d) $3\,C_s'+C_{3v}$ in C_{3v} e) $2\,C_s'+C_s''+C_{3v}$ in C_{3v} f) $3\,C_1+C_3$ in C_3	$3\,C_2'+D_3$ in D_3 $2\,C_2'+C_2''+D_3$ in D_3
3+3+2+2	a) $2\,C_{2v}'+2\,C_{3v}$ in D_{3h} b) $C_{2v}'+C_{2v}''+2C_{3v}$ in D_{3h} c) $2\,C_s+2\,C_3$ in C_{3h}	$2\,C_2'+2\,C_3$ in D_3 $C_2'+C_2''+2\,C_3$ in D_3
3+3+2+1+1	—	
3+3+1+1+1+1	a) $2\,C_s'+4\,C_{3v}$ in C_{3v} b) $C_s'+C_s''+4\,C_{3v}$ in C_{3v} c) $2\,C_1+4\,C_3$ in C_3	
3+2+2+2+1	a) $C_{2v}+3C_{3v}+D_{3h}$ in D_{3h}	$C_2+3\,C_3+D_3$ in D_3, $C_s+3\,C_3+C_{3h}$ in C_{3h}
3+2+2+1+1+1	—	
3+2+1+1+1+1+1	—	
3+1+1+1+1+1+1+1	a) $C_s+7\,C_{3v}$ in C_{3v}	$C_1+7\,C_3$ in C_3
2+2+2+2+2	a) $5\,C_{\infty v}$ in $D_{\infty h}$	$5\,C_\infty$ in D_∞, $5\,C_\infty$ in $C_{\infty h}$, $5\,C_{qv}$ in D_{qh}, $5\,C_{qv}$ in D_{qd}, $5\,C_q$ in D_q, $5\,C_q$ in C_{qh}, $5\,C_p$ in C_{pi}, $5\,C_{m/2}$ in S_m, $5\,C_{2v}'$ in D_{2h}, $5\,C_2'$ in D_2
	b) $3C_{2v}'+C_{2v}''+C_{2v}'''$ in D_{2h}	$3\,C_2'+C_2''+C_2'''$ in D_2
	c) $2\,C_{2v}'+2\,C_{2v}''+C_{2v}'''$ in D_{2h}	$2\,C_2'+2\,C_2''+C_2'''$ in D_2
	d) $2\,C_s+3\,C_2$ in C_{2h}	

	e) $3\,C_s + 2\,C_2$ in C_{2h} f) $4\,C_s + C_2$ in C_{2h} g) $3\,C_{2v}' + 2\,C_{2v}''$ in D_{2h} h) $4\,C_{2v}' + C_{2v}''$ in D_{2h} i) $3\,C_s' + 2\,C_s''$ in C_{2v} k) $4\,C_s' + C_s''$ in C_{2v} l) $5\,C_s'$ in C_{2v} m) $5\,C_1$ in C_s n) $5\,C_s$ in C_{2h} o) $5\,C_1$ in C_i p) $5\,C_1$ in C_2	$3\,C_2' + 2\,C_2''$ in D_2 $4\,C_2' + C_2''$ in D_2, $4\,C_2 + C_s$ in C_{2h}
2+2+2+2+1+1	a) $2C_s' + 2C_s'' + 2C_{2v}$ in C_{2v} b) $3\,C_s' + C_s'' + 2\,C_{2v}$ in C_{2v} c) $4\,C_s' + 2\,C_{2v}$ in C_{2v} d) $4\,C_1 + 2\,C_s$ in C_s e) $4\,C_1 + 2\,C_2$ in C_2	
2+2+2+1+1+1+1	a) $2C_s' + C_s'' + 4C_{2v}$ in C_{2v} b) $3\,C_s' + 4\,C_{2v}$ in C_{2v} c) $3\,C_1 + 4\,C_s$ in C_s d) $3\,C_1 + 4\,C_2$ in C_2	
2+2+1+1+1+1+1+1	a) $2\,C_s' + 6\,C_{2v}$ in C_{2v} b) $C_s' + C_s'' + 6\,C_{2v}$ in C_{2v} c) $2\,C_1 + 6\,C_2$ in C_2 d) $2\,C_1 + 6\,C_s$ in C_s	
2+1+1+1+1+1+1+1+1	a) $C_s + 8\,C_{2v}$ in C_{2v} b) $C_1 + 8\,C_s$ in C_s	$C_1 + 8\,C_2$ in C_2
1+1+1+1+1+1+1+1+1+1	a) $10\,C_{\infty v}$ in $C_{\infty v}$ b) $10\,C_s$ in C_s c) $10\,C_1$ in C_1	$10\,C_\infty$ in C_∞, $10\,C_{qv}$ in C_{qv}, $10\,C_q$ in C_q
11	a) C_{2v} in D_{11h}	C_2 in D_{11}, C_s in C_{11h}, C_s in C_{11v}, C_1 in C_{11}
10+1	a) $C_{2v} + D_{10h}$ in D_{10h}	$C_2 + D_{10}$ in D_{10}, $C_2 + D_{5d}$ in D_{5d}, $C_5 + C_{10h}$ in C_{10h}
	b) $C_s + C_{10v}$ in C_{10v}	$C_1 + C_{10}$ in C_{10}
	c) $C_s + D_{5d}$ in D_{5d}	$C_1 + C_{5i}$ in C_{5i}
	d) $C_s^{\perp} + D_{5h}$ in D_{5h}	$C_1 + C_{5v}$ in C_{5v}
	e) $C_1 + D_5$ in D_5	
	f) $C_s^{\parallel} + D_{5h}$ in D_{5h}	$C_1 + C_{5h}$ in C_{5h}
9+2	a) $C_{2v} + C_{9v}$ in D_{9h}	$C_2 + C_9$ in D_9, $C_s + C_9$ in C_{9h}
9+1+1	a) $C_s + 2\,C_{9v}$ in C_{9v}	$C_1 + 2\,C_9$ in C_9

8+3	—	
8+2+1	a) $C_{2v}+C_{8v}+D_{8h}$ in D_{8h}	$C_2+C_8+D_8$ in D_8, $C_2+C_{4v}+D_{4d}$ in D_{4d}, $C_s+C_8+C_{8h}$ in C_{8h}
	b) $C_s+C_{4v}+D_{4d}$ in D_{4d}	$C_1+C_4+S_8$ in S_8
	c) $C_s^{\perp}+C_{4v}+D_{4h}$ in D_{4h}	
	d) $C_1+C_4+D_4$ in D_4	
	e) $C_1+C_{2v}+D_{2d}$ in D_{2d}	
	f) $C_s^{\parallel}+C_{4v}+D_{4h}$ in D_{4h}	$C_1+C_4+C_{4h}$ in C_{4h}
	g) $C_1+C_{2v}+D_{2h}$ in D_{2h}	
8+1+1+1	a) $C_s+3\,C_{8v}$ in C_{8v}	$C_1+3\,C_8$ in C_8
	b) $C_1+3\,C_{4v}$ in C_{4v}	
7+4	—	
7+3+1	—	
7+2+2	a) $C_{2v}+2\,C_{7v}$ in D_{7h}	$C_2+2\,C_7$ in D_7, $C_s+2\,C_7$ in C_{7h}
7+2+1+1	—	
7+1+1+1+1	a) $C_s+4\,C_{7v}$ in C_{7v}	$C_1+4\,C_7$ in C_7
6+5	—	
6+4+1	a) $C_{2v}+C_{3v}+T_d$ in T_d	C_2+C_3+T in T
6+3+2	a) $C_s^{\perp}+C_{2v}+C_{3v}$ in D_{3h}	
	b) $C_s^{\parallel}+C_{2v}^{\parallel}+C_{3v}$ in D_{3h}	
	c) $C_s^{\parallel}+C_{2v}^{\perp}+C_{3v}$ in D_{3h}	
	d) $C_1+C_s+C_3$ in C_{3h}	
	e) $C_1+C_2+C_3$ in D_3	
6+3+1+1	a) $C_1+C_s+2\,C_{3v}$ in C_{3v}	
6+2+2+1	a) $C_{2v}+2\,C_{6v}+D_{6h}$ in D_{6h}	$C_2+2\,C_6+D_6$ in D_6, $C_2+2\,C_{3v}+D_{3d}$ in D_{3d}, $C_s+2\,C_6+C_{6h}$ in C_{6h}
	b) $C_s+2\,C_{3v}+D_{3d}$ in D_{3d}	$C_1+2\,C_3+C_{3i}$ in C_{3i}
	c) $C_s^{\perp}+2\,C_{3v}+D_{3h}$ in D_{3h}	
	d) $C_1+2\,C_3+D_3$ in D_3	
	e) $C_s^{\parallel}+2\,C_{3v}+D_{3h}$ in D_{3h}	$C_1+2\,C_3+C_{3h}$ in C_{3h}
6+2+1+1+1	—	
6+1+1+1+1+1	a) $C_s+5\,C_{6v}$ in C_{6v}	$C_1+5\,C_6$ in C_6
	b) $C_1+5\,C_{3v}$ in C_{3v}	
5+5+1	a) $2\,C_{2v}'+D_{5h}$ in D_{5h}	$2\,C_2'+D_5$ in D_5
	b) $C_{2v}'+C_{2v}''+D_{5h}$ in D_{5h}	$C_2'+C_2''+D_5$ in D_5
	c) $2\,C_s+C_{5h}$ in C_{5h}	
	d) $2\,C_s'+C_{5v}$ in C_{5v}	
	e) $C_s'+C_s''+C_{5v}$ in C_{5v}	
	f) $2\,C_1+C_5$ in C_5	

5+4+2	—	
5+4+1+1	—	
5+3+3	—	
5+3+2+1	—	
5+3+1+1+1	—	
5+2+2+2	a) $C_{2v}+3\,C_{5v}$ in D_{5h}	$C_2+3\,C_5$ in D_5, $C_s+3\,C_5$ in C_{5h}
5+2+2+1+1	—	
5+2+1+ 1+1+1	—	
5+1+1+1+ 1+1+1	a) $C_s+6\,C_{5v}$ in C_{5v}	$C_1+6\,C_5$ in C_5
4+4+3	—	
4+4+2+1	a) $2C_{2v}'+C_{4v}+D_{4h}$ in D_{4h}	$2\,C_2'+C_4+D_4$ in D_4, $2\,C_2+C_{2v}+D_{2d}$ in D_{2d}
	b) $C_{2v}'+C_{2v}''+C_{4v}+D_{4h}$ in D_{4h}	$C_2'+C_2''+C_4+D_4$ in D_4
	c) $2\,C_s+C_4+C_{4h}$ in C_{4h}	
	d) $C_2+C_s+C_{2v}+D_{2d}$ in D_{2d}	
	e) $2\,C_s+C_{2v}+D_{2d}$ in D_{2d}	
	f) $2\,C_1+C_2+S_4$ in S_4	
	g) $2\,C_s'+C_{2v}^{\perp}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	h) $2\,C_s'+C_{2v}^{\parallel}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	i) $C_s'+C_s''+C_{2v}^{\parallel}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	k) $C_s'+C_s''+C_{2v}^{\perp,\parallel}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	l) $2\,C_1+C_2+C_{2h}$ in C_{2h}	
	m) $2\,C_1+C_s+C_{2h}$ in C_{2h}	
	n) $2\,C_1+C_2+D_2$ in D_2	
4+4+1+1+1	a) $2\,C_s'+3\,C_{4v}$ in C_{4v}	
	b) $C_s'+C_s''+3\,C_{4v}$ in C_{4v}	
	c) $2\,C_1+3\,C_4$ in C_4	
	d) $2\,C_1+3\,C_{2v}$ in C_{2v}	
4+3+3+1	—	
4+3+2+2	—	
4+3+2+1+1	—	
4+3+1+1+1+1	—	

4+2+2+2+1	a) $C_{2v}+3C_{4v}+D_{4h}$ in D_{4h}	$C_2+3\ C_4+D_4$ in D_4, $C_2+3\ C_{2v}+D_{2d}$ in D_{2d}, $C_s+3\ C_4+C_{4h}$ in C_{4h}
	b) $C_s+3\ C_{2v}+D_{2d}$ in D_{2d}	$C_1+3\ C_2+S_4$ in S_4
	c) $C_s+3\ C_{2v}^{\perp}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	d) $C_s+2\ C_{2v}^{\perp}+C_{2v}^{\parallel}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	e) $C_s+C_{2v}^{\perp}+2\ C_{2v}^{\parallel'}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	f) $C_s+3\ C_{2v}^{\parallel'}+D_{2h}$ in D_{2h}	$C_1+3\ C_2+C_{2h}$ in C_{2h}
	g) $C_s+C_{2v}^{\perp}+C_{2v}^{\parallel'}+C_{2v}^{\parallel''}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	h) $C_s+2\ C_{2v}^{\parallel'}+C_{2v}^{\parallel''}+D_{2h}$ in D_{2h}	
	i) $C_1+3\ C_s'+C_{2v}$ in C_{2v}	
	k) $C_1+2\ C_s'+C_s''+C_{2v}$ in C_{2v}	
	l) $C_1+3\ C_s+C_{2h}$ in C_{2h}	
	m) $C_1+C_2+2C_s+C_{2h}$ in C_{2h}	
	n) $C_1+2C_2+C_s+C_{2h}$ in C_{2h}	
	o) $C_1+3\ C_2'+D_2$ in D_2	
	p) $C_1+2C_2'+C_2''+D_2$ in D_2	
	q) $C_1+C_2'+C_2''+C_2'''+D_2$ in D_2	
4+2+2+1+1+1	a) $C_1+2\ C_s'+3\ C_{2v}$ in C_{2v}	
	b) $C_1+C_s'+C_s''+3\ C_{2v}$ in C_{2v}	
4+2+1+1+1+1+1	a) $C_1+C_s+5\ C_{2v}$ in C_{2v}	
4+1+1+1+1+1+1+1	a) $C_s+7\ C_{4v}$ in C_{4v}	$C_1+7\ C_4$ in C_4
	b) $C_1+7\ C_{2v}$ in C_{2v}	
3+3+3+2	a) $3\ C_{2v}'+C_{3v}$ in D_{3h}	$3\ C_2'+C_3$ in D_3
	b) $2C_{2v}'+C_{2v}''+C_{3v}$ in D_{3h}	$2\ C_2'+C_2''+C_3$ in D_3
	c) $3\ C_s+C_3$ in C_{3h}	
3+3+3+1+1	a) $3\ C_s'+2\ C_{3v}$ in C_{3v}	
	b) $2\ C_s'+C_s''+2\ C_{3v}$ in C_{3v}	
	c) $3\ C_1+2\ C_3$ in C_3	
3+3+2+2+1	a) $2C_{2v}'+2C_{3v}+D_{3h}$ in D_{3h}	$2\ C_2'+2\ C_3+D_3$ in D_3
	b) $C_{2v}'+C_{2v}''+2\ C_{3v}+D_{3h}$ in D_{3h}	$C_2'+C_2''+2\ C_3+D_3$ in D_3
	c) $2\ C_s+2\ C_3+C_{3h}$ in C_{3h}	
3+3+2+1+1+1	—	

3+3+1+1+ 1+1+1	a) $2\,C_s' + 5\,C_{3v}$ in C_{3v} b) $C_s' + C_s'' + 5\,C_{3v}$ in C_{3v} c) $2\,C_1 + 5\,C_3$ in C_3	
3+2+2+2+2	a) $C_{2v} + 4\,C_{3v}$ in D_{3h}	$C_2 + 4\,C_3$ in D_3, $C_s + 4\,C_3$ in C_{3h}
3+2+2+ 2+1+1	—	
3+2+2+1+ 1+1+1	—	
3+2+1+1+ 1+1+1+1	—	
3+1+1+1+1+ 1+1+1+1	a) $C_s + 8\,C_{3v}$ in C_{3v}	$C_1 + 8\,C_3$ in C_3
2+2+2+2+ 2+1	a) $5\,C_{\infty v} + D_{\infty h}$ in $D_{\infty h}$	$5\,C_\infty + D_\infty$ in D_∞, $5\,C_\infty + C_{\infty h}$ in $C_{\infty h}$, $5\,C_{qv} + D_{qh}$ in D_{qh}, $5\,C_{qv} + D_{qd}$ in D_{qd}, $5\,C_q + D_q$ in D_q, $5\,C_q + C_{qh}$ in C_{qh}, $5\,C_p + C_{pi}$ in C_{pi}, $5\,C_{m/2} + S_m$ in S_m, $5\,C_{2v}' + D_{2h}$ in D_{2h}, $5\,C_2' + D_2$ in D_2
	b) $3\,C_{2v}' + C_{2v}'' + C_{2v}''' + D_{2h}$ in D_{2h}	$3\,C_2' + C_2'' + C_2''' + D_2$ in D_2
	c) $2\,C_{2v}' + 2\,C_{2v}'' + C_{2v}''' + D_{2h}$ in D_{2h}	$2\,C_2' + 2\,C_2'' + C_2''' + D_2$ in D_2
	d) $2\,C_s + 3\,C_2 + C_{2h}$ in C_{2h}	
	e) $3\,C_s + 2\,C_2 + C_{2h}$ in C_{2h}	
	f) $4\,C_s + C_2 + C_{2h}$ in C_{2h}	
	g) $3\,C_{2v}' + 2\,C_{2v}'' + D_{2h}$ in D_{2h}	$3\,C_2' + 2\,C_2'' + D_2$ in D_2
	h) $4\,C_{2v}' + C_{2v}'' + D_{2h}$ in D_{2h}	$4\,C_2' + C_2'' + D_2$ in D_2, $4\,C_2 + C_s + C_{2h}$ in C_{2h}
	i) $3\,C_s' + 2\,C_s'' + C_{2v}$ in C_{2v}	
	k) $4\,C_s' + C_s'' + C_{2v}$ in C_{2v}	
	l) $5\,C_s' + C_{2v}$ in C_{2v}	
	m) $5\,C_1 + C_s$ in C_s	
	n) $5\,C_s + C_{2h}$ in C_{2h}	
	o) $5\,C_1 + C_i$ in C_i	
	p) $5\,C_1 + C_2$ in C_2	
2+2+2+2+ 1+1+1	a) $2\,C_s' + 2\,C_s'' + 3\,C_{2v}$ in C_{2v} b) $3\,C_s' + C_s'' + 3\,C_{2v}$ in C_{2v} c) $4\,C_s' + 3\,C_{2v}$ in C_{2v} d) $4\,C_1 + 3\,C_s$ in C_s e) $4\,C_1 + 3\,C_2$ in C_2	
2+2+2+1+ 1+1+1+1	a) $2\,C_s' + C_s'' + 5\,C_{2v}$ in C_{2v} b) $3\,C_s' + 5\,C_{2v}$ in C_{2v}	

	c) $3\,C_1+5\,C_s$ in C_s d) $3\,C_1+5\,C_2$ in C_2	
2+2+1+1+1+1+1+1+1	a) $2\,C_s'+7\,C_{2v}$ in C_{2v} b) $C_s'+C_s''+7\,C_{2v}$ in C_{2v} c) $2\,C_1+7\,C_s$ in C_s d) $2\,C_1+7\,C_2$ in C_2	
2+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1	a) $C_s+9\,C_{2v}$ in C_{2v} b) $C_1+9\,C_s$ in C_s	$C_1+9\,C_2$ in C_2
1+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1	a) $11\,C_{\infty v}$ in $C_{\infty v}$ b) $11\,C_s$ in C_s c) $11\,C_1$ in C_1	$11C_\infty$ in C_∞, $11\,C_{qv}$ in C_{qv}, $11\,C_q$ in C_q
12	a) C_{2v} in D_{12h} b) C_s in D_{6d} c) $C_s^{\perp}$ in D_{6h} d) $C_s^{\parallel}$ in D_{6h} e) C_1 in D_6 f) C_1 in D_{3h} g) C_1 in D_{3d} h) C_{2v} in O_h i) C_s in T_h k) C_s in T_d l) C_1 in T m) C_{5v} in I_h	C_2 in D_{12}, C_2 in D_{6d}, C_s in C_{12v}, C_s in C_{12h}, C_1 in C_{12} C_1 in S_{12} C_1 in C_{6v} C_1 in C_{6h} C_2 in O C_5 in I
11+1	a) $C_{2v}+D_{11h}$ in D_{11h} b) C_s+C_{11v} in C_{11v}	C_2+D_{11} in D_{11}, C_s+C_{11h} in C_{11h} C_1+C_{11} in C_{11}
10+2	a) $C_{2v}+C_{10v}$ in D_{10h} b) C_s+C_{5v} in D_{5d} c) $C_s^{\perp}+C_{5v}$ in D_{5h} d) C_1+C_5 in D_5 e) $C_s^{\parallel}+C_{5v}$ in D_{5h}	C_2+C_{10} in D_{10}, C_2+C_{5v} in D_{5d}, C_s+C_{10} in C_{10h} C_1+C_5 in C_{5i} C_1+C_5 in C_{5h}
10+1+1	a) $C_s+2\,C_{10v}$ in C_{10v} b) $C_1+2\,C_{5v}$ in C_{5v}	$C_1+2\,C_{10}$ in C_{10}
9+3	—	
9+2+1	a) $C_{2v}+C_{9v}+D_{9h}$ in D_{9h}	$C_2+C_9+D_9$ in D_9, $C_s+C_9+C_{9h}$ in C_{9h}
9+1+1+1	a) $C_s+3\,C_{9v}$ in C_{9v}	$C_1+3\,C_9$ in C_9
8+4	a) $C_s^{\perp}+C_{2v}$ in D_{4h} b) C_1+C_2 in D_4	C_1+C_s in C_{4v}

	c) C_1+C_2 in D_{2d} d) C_1+C_s in D_{2d} e) $C_s^{\parallel}+C_{2v}$ in D_{4h} f) C_1+C_s in D_{2h}	 C_1+C_s in C_{4h}
8+3+1	—	
8+2+2	a) $C_{2v}+2\,C_{8v}$ in D_{8h}	$C_2+2\,C_8$ in D_8, $C_2+2\,C_{4v}$ in D_{4d}, $C_s+2\,C_8$ in C_{8h}
	b) $C_s+2\,C_{4v}$ in D_{4d}	$C_1+2\,C_4$ in S_8
	c) $C_s^{\perp}+2\,C_{4v}$ in D_{4h}	
	d) $C_1+2\,C_4$ in D_4	
	e) $C_1+2\,C_{2v}$ in D_{2d}	
	f) $C_s^{\parallel}+2\,C_{4v}$ in D_{4h}	$C_1+2\,C_4$ in C_{4h}
	g) $C_1+2\,C_{2v}'$ in D_{2h}	
	h) $C_1+C_2'+C_{2v}''$ in D_{2h}	
8+2+1+1	—	
8+1+1+1+1	a) $C_s+4\,C_{8v}$ in C_{8v}	$C_1+4\,C_8$ in C_8
	b) $C_1+4\,C_{4v}$ in C_{4v}	
7+5	—	
7+4+1	—	
7+3+2	—	
7+3+1+1	—	
7+2+2+1	a) $C_{2v}+2C_{7v}+D_{7h}$ in D_{7h}	$C_2+2\,C_7+D_7$ in D_7, $C_s+2\,C_7+C_{7h}$ in C_{7h}
7+2+1+1+1	—	
7+1+1+1+1+1	a) $C_s+5\,C_{7v}$ in C_{7v}	$C_1+5\,C_7$ in C_7
6+6	a) $2\,C_{2v}'$ in D_{6h}	$2\,C_2'$ in D_6, $2\,C_2$ in D_{3d}
	b) $C_{2v}'+C_{2v}''$ in D_{6h}	$C_2'+C_2''$ in D_6
	c) $2\,C_s$ in C_{6h}	
	d) $2\,C_s'$ in C_{6v}	
	e) $C_s'+C_s''$ in C_{6v}	
	f) $2\,C_1$ in C_6	
	g) C_2+C_s in D_{3d}	
	h) $2\,C_s$ in D_{3d}	
	i) $2\,C_1$ in C_{3i}	
	k) $2\,C_s^{\perp}$ in D_{3h}	
	l) $2\,C_1$ in C_{3v}	
	m) $2\,C_1$ in D_3	
	n) $2\,C_s^{\parallel}$ in D_{3h}	
	o) $C_s^{\perp}+C_s^{\parallel}$ in D_{3h}	
	p) $2\,C_1$ in C_{3h}	
	q) $2\,C_{4v}$ in O_h	$2\,C_4$ in O, $2\,C_{2v}$ in T_h, $2\,C_{2v}$ in T_d, $2\,C_2$ in T

6+5+1	—	
6+4+2	—	
6+4+1+1	—	
6+3+3	a) $C_s^{\perp} + 2\ C_{2v}'$ in D_{3h} b) $C_s^{\perp} + C_{2v}' + C_{2v}''$ in D_{3h} c) $C_s^{\parallel} + 2\ C_{2v}^{\parallel}$ in D_{3h} d) $C_s^{\parallel} + 2\ C_{2v}^{\perp}$ in D_{3h} e) $C_s^{\parallel} + C_{2v}^{\perp} + C_{2v}^{\parallel}$ in D_{3h} f) $C_1 + 2\ C_s$ in C_{3h} g) $C_1 + 2\ C_2'$ in D_3 h) $C_1 + C_2' + C_2''$ in D_3 i) $C_1 + 2\ C_s'$ in C_{3v} k) $C_1 + C_s' + C_s''$ in C_{3v}	
6+3+2+1	a) $C_s^{\perp} + C_{2v} + C_{3v} + D_{3h}$ in D_{3h} b) $C_s^{\parallel} + C_{2v}^{\parallel} + C_{3v} + D_{3h}$ in D_{3h} c) $C_s^{\parallel} + C_{2v}^{\perp} + C_{3v} + D_{3h}$ in D_{3h} d) $C_1 + C_s + C_3 + C_{3h}$ in C_{3h} e) $C_1 + C_2 + C_3 + D_3$ in D_3	
6+3+1+1+1	a) $C_1 + C_s + 3\ C_{3v}$ in C_{3v}	
6+2+2+2	a) $C_{2v} + 3\ C_{6v}$ in D_{6h} b) $C_s + 3\ C_{3v}$ in D_{3d} c) $C_s^{\perp} + 3\ C_{3v}$ in D_{3h} d) $C_1 + 3\ C_3$ in D_3 e) $C_s^{\parallel} + 3\ C_{3v}$ in D_{3h}	$C_2 + 3\ C_6$ in D_6, $C_2 + 3\ C_{3v}$ in D_{3d}, $C_s + 3\ C_6$ in C_{6h} $C_1 + 3\ C_3$ in C_{3i} $C_1 + 3\ C_3$ in C_{3h}
6+2+2+1+1	—	
6+2+1+1+1+1	—	
6+1+1+1+ 1+1+1	a) $C_s + 6\ C_{6v}$ in C_{6v} b) $C_1 + 6\ C_{3v}$ in C_{3v}	$C_1 + 6\ C_6$ in C_6
5+5+2	a) $2\ C_{2v}' + C_{5v}$ in D_{5h} b) $C_{2v}' + C_{2v}'' + C_{5v}$ in D_{5h} c) $2\ C_s + C_5$ in C_{5h}	$2\ C_2' + C_5$ in D_5 $C_2' + C_2'' + C_5$ in D_5
5+5+1+1	a) $2\ C_s' + 2\ C_{5v}$ in C_{5v} b) $C_s' + C_s'' + 2\ C_{5v}$ in C_{5v} c) $2\ C_1 + 2\ C_5$ in C_5	
5+4+3	—	

5+4+2+1	—	
5+4+1+1+1	—	
5+3+3+1	—	
5+3+2+2	—	
5+3+2+1+1	—	
5+3+1+1+1+1	—	
5+2+2+2+1	a) $C_{2v}+3C_{5v}+D_{5h}$ in D_{5h}	$C_2+3\ C_5+D_5$ in D_5, $C_s+3\ C_5+C_{5h}$ in C_{5h}
5+2+2+1+1+1	—	
5+2+1+1+1+1+1	—	
5+1+1+1+1+1+1+1	a) $C_s+7\ C_{5v}$ in C_{5v}	$C_1+7\ C_5$ in C_5
4+4+4	a) $3\ C_{2v}'$ in D_{4h} b) $3\ C_s'$ in C_{4v} c) $2\ C_{2v}'+C_{2v}''$ in D_{4h} d) $2\ C_s'+C_s''$ in C_{4v} e) $3\ C_s$ in C_{4h} f) $3\ C_1$ in C_4 g) $2\ C_2+C_s$ in D_{2d} h) $C_2+2\ C_s$ in D_{2d} i) $3\ C_s$ in D_{2d} k) $3\ C_1$ in S_4 l) $3\ C_s'$ in D_{2h} m) $3\ C_1$ in C_{2v} n) $2\ C_s'+C_s''$ in D_{2h} o) $C_s'+C_s''+C_s'''$ in D_{2h} p) $3\ C_1$ in C_{2h} q) $3\ C_1$ in D_2 r) $3\ C_{3v}$ in T_d s) $2\ C_{3v}+C_{3v}'$ in T_d	$3\ C_2'$ in D_4, $3\ C_2$ in D_{2d} $2\ C_2'+C_2''$ in D_4 $3\ C_3$ in T $2\ C_3+C_3'$ in T
4+4+3+1	—	
4+4+2+2	a) $2\ C_{2v}'+2\ C_{4v}$ in D_{4h} b) $C_{2v}'+C_{2v}''+2\ C_{4v}$ in D_{4h} c) $2\ C_s+2\ C_4$ in C_{4h} d) $C_2+C_s+2\ C_{2v}$ in D_{2d} e) $2\ C_s+2\ C_{2v}$ in D_{2d} f) $2\ C_1+2\ C_2$ in S_4 g) $2\ C_s'+2\ C_{2v}^{\perp}$ in D_{2h}	$2\ C_2'+2\ C_4$ in D_4, $2\ C_2+2\ C_{2v}$ in D_{2d} $C_2'+C_2''+2\ C_4$ in D_4

	h) $2\,C_s' + C_{2v}^{\perp} + C_{2v}^{\parallel}$ in D_{2h}	
	i) $2\,C_s' + 2\,C_{2v}^{\parallel\prime}$ in D_{2h}	
	k) $2\,C_s' + C_{2v}^{\parallel\prime} + C_{2v}^{\parallel\prime\prime}$ in D_{2h}	
	l) $C_s' + C_s'' + 2\,C_{2v}^{\parallel}$ in D_{2h}	
	m) $C_s' + C_s'' + 2\,C_{2v}^{\perp,\parallel}$ in D_{2h}	
	n) $C_s' + C_s'' + C_{2v}^{\parallel} + C_{2v}^{\perp,\parallel}$ in D_{2h}	
	o) $2\,C_1 + 2\,C_2$ in C_{2h}	
	p) $2\,C_1 + C_2 + C_s$ in C_{2h}	
	q) $2\,C_1 + 2\,C_s$ in C_{2h}	
	r) $2\,C_1 + 2\,C_s'$ in C_{2v}	
	s) $2\,C_1 + C_s' + C_s''$ in C_{2v}	
	t) $2\,C_1 + 2\,C_2'$ in D_2	
	u) $2\,C_1 + C_2' + C_2''$ in D_2	
4+4+2+1+1	a) $2\,C_1 + C_s + 2\,C_{2v}$ in C_{2v}	
4+4+1+1+1+1	a) $2\,C_s' + 4\,C_{4v}$ in C_{4v}	
	b) $C_s' + C_s'' + 4\,C_{4v}$ in C_{4v}	
	c) $2\,C_1 + 4\,C_4$ in C_4	
	d) $2\,C_1 + 4\,C_{2v}$ in C_{2v}	
4+3+3+2	—	
4+3+3+1+1	—	
4+3+2+2+1	—	
4+3+2+1+1+1	—	
4+3+1+1+1+1+1	—	
4+2+2+2+2	a) $C_{2v} + 4\,C_{4v}$ in D_{4h}	$C_2 + 4\,C_4$ in D_4, $C_2 + 4\,C_{2v}$ in D_{2d}, $C_s + 3\,C_4$ in C_{4h}
	b) $C_s + 4\,C_{2v}$ in D_{2d}	$C_1 + 4\,C_2$ in S_4
	c) $C_s + 4\,C_{2v}^{\perp}$ in D_{2h}	
	d) $C_s + 3\,C_{2v}^{\perp} + C_{2v}$ in D_{2h}	
	e) $C_s + 2\,C_{2v}^{\perp} + 2\,C_{2v}^{\parallel\prime}$ in D_{2h}	
	f) $C_s + 2\,C_{2v}^{\perp} + C_{2v}^{\parallel\prime} + C_{2v}^{\parallel\prime\prime}$ in D_{2h}	
	g) $C_s + C_{2v}^{\perp} + 3\,C_{2v}^{\parallel\prime}$ in D_{2h}	
	h) $C_s + C_{2v}^{\perp} + 2\,C_{2v}^{\parallel\prime} + C_{2v}^{\parallel\prime\prime}$ in D_{2h}	
	i) $C_s + 4\,C_{2v}^{\parallel\prime}$ in D_{2h}	$C_1 + 4\,C_2$ in C_{2h}
	k) $C_s + 3\,C_{2v}^{\parallel\prime} + C_{2v}^{\parallel\prime\prime}$ in D_{2h}	
	l) $C_s + 2\,C_{2v}^{\parallel\prime} + 2\,C_{2v}^{\parallel\prime\prime}$ in D_{2h}	

	m) $C_1+4\,C_s'$ in C_{2v} n) $C_1+3\,C_s'+C_s''$ in C_{2v} o) $C_1+2\,C_s'+2\,C_s''$ in C_{2v} p) $C_1+4\,C_s$ in C_{2h} q) $C_1+C_2+3\,C_s$ in C_{2h} r) $C_1+2\,C_2+2\,C_s$ in C_{2h} s) $C_1+3\,C_2+C_s$ in C_{2h} t) $C_1+4\,C_2'$ in D_2 u) $C_1+3\,C_2'+C_2''$ in D_2 v) $C_1+2\,C_2'+2\,C_2''$ in D_2 w) $C_1+2\,C_2'+C_2''+C_2'''$ in D_2	
4+2+2+2+1+1	a) $C_1+3\,C_s'+2\,C_{2v}$ in C_{2v} b) $C_1+2\,C_s'+C_s''+2\,C_{2v}$ in C_{2v}	
4+2+2+1+1+1+1	a) $C_1+2C_s'+4C_{2v}$ in C_{2v} b) $C_1+C_s'+C_s''+4C_{2v}$ in C_{2v}	
4+2+1+1+1+1+1+1	a) $C_1+C_s+6\,C_{2v}$ in C_{2v}	
4+1+1+1+1+1+1+1+1	a) $C_s+6\,C_{4v}$ in C_{4v} b) $C_1+6\,C_{2v}$ in C_{2v}	$C_1+6\,C_4$ in C_4
3+3+3+3	a) $4\,C_{2v}'$ in D_{3h} b) $3\,C_{2v}'+C_{2v}''$ in D_{3h} c) $2\,C_{2v}'+2\,C_{2v}''$ in D_{3h} d) $4\,C_s$ in D_{3h} e) $4\,C_s'$ in C_{3v} f) $3\,C_s'+C_s''$ in C_{3v} g) $2\,C_s'+2\,C_s''$ in C_{3v} h) $4\,C_1$ in C_3	$4\,C_2'$ in D_3 $3\,C_2'+C_2''$ in D_3 $2\,C_2'+2\,C_2''$ in D_3
3+3+3+2+1	a) $3\,C_{2v}'+C_{3v}+D_{3h}$ in D_{3h} b) $2\,C_{2v}'+C_{2v}''+C_{3v}+D_{3h}$ in D_{3h} c) $3\,C_s+C_3+C_{3h}$ in C_{3h}	$3\,C_2'+C_3+D_3$ in D_3 $2\,C_2'+C_2''+C_3+D_3$ in D_3
3+3+3+1+1+1	a) $3\,C_s'+3\,C_{3v}$ in C_{3v} b) $2\,C_s'+C_s''+3\,C_{3v}$ in C_{3v} c) $3\,C_1+3\,C_3$ in C_3	
3+3+2+2+2	a) $2\,C_{2v}'+3\,C_{3v}$ in D_{3h} b) $C_{2v}'+C_{2v}''+3C_{3v}$ in D_{3h} c) $2\,C_s+3\,C_3$ in C_{3h}	$2\,C_2'+3\,C_3$ in D_3 $C_2'+C_2''+3\,C_3$ in D_3
3+3+2+2+1+1	—	

3+3+2+1+ 1+1+1	—	
3+3+1+1+ 1+1+1+1	a) $2\,C_s' + 6\,C_{3v}$ in C_{3v} b) $C_s' + C_s'' + 6\,C_{3v}$ in C_{3v} c) $2\,C_1 + 6\,C_3$ in C_3	
3+2+2+ 2+2+1	a) $C_{2v} + 4\,C_{3v} + D_{3h}$ in D_{3h}	$C_2 + 4\,C_3 + D_3$ in D_3, $C_s + 4\,C_3 + C_{3h}$ in C_{3h}
3+2+2+2+ 1+1+1	—	
3+2+2+1+ 1+1+1+1	—	
3+2+1+1+1+ 1+1+1+1	—	
3+1+1+1+1+ 1+1+1+1+1	a) $C_s + 9\,C_{3v}$ in C_{3v}	$C_1 + 9\,C_3$ in C_3
2+2+2+2+ 2+2	a) $6\,C_{\infty v}$ in $D_{\infty h}$	$6\,C_\infty$ in D_∞, $6\,C_\infty$ in $C_{\infty h}$, $6\,C_{qv}$ in D_{qh}, $6\,C_{qv}$ in D_{qd}, $6\,C_q$ in D_q, $6\,C_p$ in C_{pi}, $6\,C_{m/2}$ in S_m, $6\,C_{2v}'$ in D_{2h}, $6\,C_2'$ in D_2
	b) $4\,C_{2v}' + C_{2v}'' + C_{2v}'''$ in D_{2h}	$4\,C_2' + C_2'' + C_2'''$ in D_2
	c) $3\,C_{2v}' + 2\,C_{2v}'' + C_{2v}'''$ in D_{2h}	$3\,C_2' + 2\,C_2'' + C_2'''$ in D_2
	d) $2\,C_{2v}' + 2\,C_{2v}'' + 2\,C_{2v}'''$ in D_{2h}	$2\,C_2' + 2\,C_2'' + 2\,C_2'''$ in D_2
	e) $2\,C_s + 4\,C_2$ in C_{2h}	
	f) $3\,C_s + 3\,C_2$ in C_{2h}	
	g) $4\,C_s + 2\,C_2$ in C_{2h}	
	h) $5\,C_s + C_2$ in C_{2h}	
	i) $3\,C_{2v}' + 3\,C_{2v}''$ in D_{2h}	$3\,C_2' + 3\,C_2''$ in D_2
	k) $4\,C_{2v}' + 2\,C_{2v}''$ in D_{2h}	$4\,C_2' + 2\,C_2''$ in D_2
	l) $5\,C_{2v}' + C_{2v}''$ in D_{2h}	$5\,C_2' + C_2''$ in D_2, $5\,C_2 + C_s$ in C_{2h}
	m) $3\,C_s' + 3\,C_s''$ in C_{2v}	
	n) $4\,C_s' + 2\,C_s''$ in C_{2v}	
	o) $5\,C_s' + C_s''$ in C_{2v}	
	p) $6\,C_s'$ in C_{2v}	
	q) $6\,C_1$ in C_s	
	r) $6\,C_s$ in C_{2h}	
	s) $6\,C_1$ in C_2	
	t) $6\,C_1$ in C_i	
2+2+2+2+ 2+1+1	a) $3\,C_s' + 2\,C_s'' + 2\,C_{2v}$ in C_{2v} b) $4\,C_s' + C_s'' + 2\,C_{2v}$ in C_{2v} c) $5\,C_s' + 2\,C_{2v}$ in C_{2v}	

	d) $5\,C_1 + 2\,C_s$ in C_s e) $5\,C_1 + 2\,C_2$ in C_2	
2+2+2+2+1+1+1+1	a) $2C_s' + 2C_s'' + 4C_{2v}$ in C_{2v} b) $3\,C_s' + C_s'' + 4\,C_{2v}$ in C_{2v} c) $4\,C_s' + 4\,C_{2v}$ in C_{2v} d) $4\,C_1 + 4\,C_s$ in C_s e) $4\,C_1 + 4\,C_2$ in C_2	
2+2+2+1+1+1+1+1+1	a) $2C_s' + C_s'' + 6C_{2v}$ in C_{2v} b) $3\,C_s' + 6\,C_{2v}$ in C_{2v} c) $3\,C_1 + 6\,C_s$ in C_s d) $3\,C_1 + 6\,C_2$ in C_2	
2+2+1+1+1+1+1+1+1+1	a) $2\,C_s' + 8\,C_{2v}$ in C_{2v} b) $C_s' + C_s'' + 8\,C_{2v}$ in C_{2v} c) $2\,C_1 + 8\,C_s$ in C_s d) $2\,C_1 + 8\,C_2$ in C_2	
2+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1	a) $C_s + 10\,C_{2v}$ in C_{2v} b) $C_1 + 10\,C_s$ in C_s	$C_1 + 10\,C_2$ in C_2
1+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1	a) $12\,C_{\infty v}$ in $C_{\infty v}$ b) $12\,C_s$ in C_s c) $12\,C_1$ in C_1	$12\,C_\infty$ in C_∞, $12\,C_{qv}$ in C_{qv}, $12\,C_q$ in C_q

Falls es nun gelingen sollte, die Punktsymmetriegruppe eindeutig zu ermitteln, könnten offerbar umgekehrt Schlüsse auf die Eigensymmetrie der Teilchen gezogen werden. Dabei setzt die Symmetriebedingung der Punktlage aber nur eine minimale Eigensymmetrie voraus, so dass sich auch hier im allgemeinen Vieldeutigkeit ergeben wird. Höchstens da, wo eine bestimmte Punktlage völlig für das Auftreten einer niedrigeren Punktsymmetriegruppe verantwortlich gemacht werden kann, ist die Eigensymmetrie ihrer Teilchen auch nach oben abgegrenzt.

Schliesslich seien noch die Grenzen der Leistungsfähigkeit von Symmetriebetrachtungen zur Kennzeichnung des Molekülbaues abgesteckt. Schon in topologischer Hinsicht ergeben sich Vieldeutigkeiten: sind mehrere Punktlagen besetzt, so lässt die Symmetrielehre die Frage nach der gegenseitigen Lage ihrer Punkte offen. Enthält die Punktgruppe mehrere gleichwertige Untergruppen, so kann für die entsprechenden Spezialformen eine Vieldeutigkeit bezüglich der Stellung entstehen. Vor allem aber ist die Symmetrielehre nicht in der Lage, beim Auftreten von geometrischen Freiheitsgraden metrische Fragestellungen zu beantwor-

ten; die, bezogen auf ein symmetriegerecht gewähltes Koordinatensystem, sich ergebenden Parameter bleiben also im allgemeinen unbestimmt. Metrische Bedeutung können höchstens die Aussagen gewinnen, die sich auf das Fehlen von Freiheitsgraden beziehen, denn die Symmetrielehre muss sich darauf beschränken, für Punkte, die auf Symmetrieelementen liegen, diese als geometrische Örter zu bezeichnen.

III. Die Aussagen der Symmetrielehre über die Molekülschwingungen

Ein aus N Masseteilchen aufgebautes System hat bekanntlich 3N Freiheitsgrade der Schwingung. Nach Abzug der Translationen und Rotationen des Gesamtsystems als den „uneigentlichen" Schwingungen verbleiben für

lineare Moleküle	$3N-5$, davon $N-1$ in der Achse
planare Moleküle	$3N-6$, davon $2N-3$ in der Ebene
die übrigen Moleküle	$3N-6$ Freiheitsgrade.

Die Grundsymmetrie des Moleküls bestimmt nun, wie sich diese Freiheitsgrade auf die verschiedenen Normalschwingungstypen verteilen, und welcher Art die Normalschwingungen überhaupt sind.

Die Ermittlung der Normalschwingungstypen bereitet keine Schwierigkeiten. Schon Brester (4) hat sie durchgeführt, und später zeigte Wigner (13) die Möglichkeit der Anwendung gruppentheoretischer Methoden. In der durch Tisza (12), Placzek (10), Rosenthal und Murphy (11) weiter ausgebauten gruppentheoretischen Betrachtungsweise finden die Normalschwingungen ihren Ausdruck in der Matrizendarstellung der Charaktere für die irreduziblen Darstellungen der zur Grundsymmetrie des Schwingungssystems isomorphen Klassen. Schliesslich hat P. Niggli (8) gezeigt, wie man im wesentlichen ohne gruppentheoretische Hilfsmittel zu diesen Charakterentafeln gelangen kann.

Jeder Schwingungstyp wird durch sein Verhalten gegenüber den Symmetrieelementen der Grundkonfiguration gekennzeichnet, wie das ja die übliche Bezeichnungsweise der Schwingungen andeuten soll. Wenn auch jedem Verrückungsbild eine bestimmte Restsymmetrie zugeschrieben werden kann, so ist doch mit dem Abbau der Grundsymmetrie die Beschreibung keineswegs erschöpft. Die Tatsache, dass eine Schwingung zu einem Symmetrieelement antisymmetrisch oder entartet verläuft, besagt nicht etwa nur, dass sich die zugehörige Koordinatentransfor-

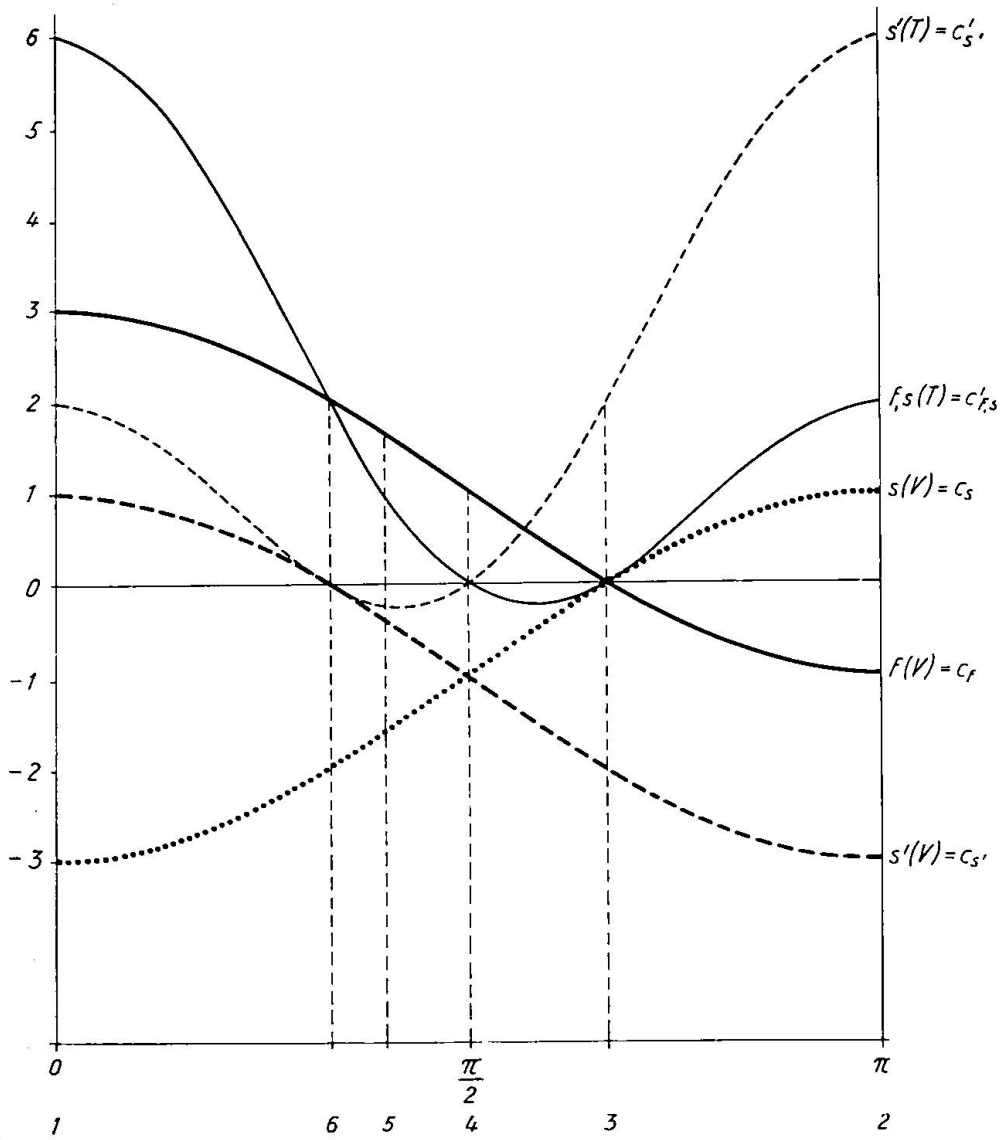
mation nicht mehr auf die Verrückungsvektoren ausüben lasse, sondern dass nach Ausführung der Transformation die Vektoren ihre Richtung umkehren bzw. um ganz bestimmte Winkelbeträge gedreht werden. Die Verhältnisse liegen hier ähnlich wie bei den Raumgruppen: auch dort genügt im allgemeinen die Symmetriebedingung eines Nullpunktes nicht mehr zur Beschreibung. Wie für die nicht-symmorphen Raumgruppen Gleitspiegelebenen und Schraubenachsen als neue Symmetrieelemente eingeführt werden müssen, so treten in den nicht-totalsymmetrischen Schwingungen Antisymmetrieelemente und Entartungsachsen auf. Die Einführung dieser Antisymmetrieelemente ist um so mehr gerechtfertigt, als sich mit ihrer Einbeziehung eine ganze „erweiterte Symmetrielehre" mit all ihren Symmetriesätzen aufbauen lässt, die dann die Symmetrieeigenschaften der Normalschwingungen liefert. Ihre Entwicklung würde an dieser Stelle zu weit führen, doch zeigt es sich dabei, dass die Analogie zwischen Schwingungsformen und Raumgruppen sogar soweit geht, dass jeder erweiterten Punktgruppe einer kristallographischen Schwingungsklasse eine Raumgruppe isomorph ist. Im übrigen ist es ja nur eine Frage der Darstellungsweise, ob man den Abbau der Grundsymmetrie auf antisymmetrisches Verhalten der Teilchen oder auf die ohnehin nur in der Vorstellung vorhandenen Symmetrieelemente zurückführen will.

Die Symmetriebedingungen der einzelnen Punktlagen wählen nun aus der Gesamtheit der Normalschwingungstypen diejenigen aus, zu deren Schwingungen ihre Freiheitsgrade einen Beitrag leisten. Dazu muss das Verhalten bezüglich der zur Symmetriebedingung gehörigen Elemente mit dem durch die Symmetrieeigenschaften der Normalschwingung geforderten übereinstimmen. So ergibt sich eine Auslese, wie sie für die einzelnen Punktgruppen etwa von JAHN und TELLER (6), von KOHLRAUSCH (7) und von HERZBERG (5), für einige ausgewählte Punktkombinationen von WILSON (14) und schliesslich allgemeiner für die Symmetriebedingungen von P. NIGGLI (8) zusammengestellt wurde. Dass sich in Kombinationen die Beiträge der einzelnen Punktlagen additiv verhalten, ist leicht einzusehen. Gegeben sei etwa die Kombination zweier Punktner P und Q. Für eine herausgegriffene Schwingungsklasse habe, die uneigentlichen Schwingungen eingerechnet, ein P-Teilchen p und ein Q-Teilchen q Freiheitsgrade; von diesen Freiheitsgraden seien s den P- und Q-Teilchen gemeinsam. In der Kombination treten dann als Normalschwingungen für die betreffende Klasse auf: $p-s$ P-Schwingungen, an denen Q nicht teilnimmt, $q-s$ Q-Schwingungen, an denen P nicht teilnimmt, und $2s$ gekoppelte Schwingungen beider Punktner, nämlich s miteinander und

s gegeneinander, also insgesamt $p+q$ Schwingungen. Die uneigentlichen Schwingungen, deren Klassenzugehörigkeit an dem Verhalten zu ausgezeichneten Symmetrieelementen leicht erkennbar ist, müssen natürlich für das Gesamtsystem nur einmal in Abzug gebracht werden.

Die Auswahlregeln, die über die Beobachtbarkeit der einzelnen Normalschwingungen, ihrer Kombinations- und Oberschwingungen entscheiden, sind für Infrarotspektrum und Ramaneffekt nicht dieselben, so dass sich die beiden Methoden ergänzen können. Auch diese Auswahlregeln können, wie schon WIGNER (13), dann ROSENTHAL und MURPHY (11) und vor allem BHAGAVANTAM (1, 2) gezeigt haben, mit Hilfe von gruppentheoretischen Methoden einen der Symmetrielehre angemessenen Ausdruck finden. Im Infrarotspektrum tritt eine Schwingung bekanntlich dann auf, wenn sie den Vektor des elektrischen Moments, und im Ramaneffekt, wenn sie den Tensor der Polarisierbarkeit des Moleküls ändert. Dementsprechend bestimmen die Transformationseigenschaften dieser Grössen gegenüber den möglichen Symmetrieoperationen die Auswahlregeln. Da sich ihrer Form nach die Infrarotbanden von Schwingungen mit wechselnder Komponente des elektrischen Moments parallel oder senkrecht zu einer ausgezeichneten Achse unterscheiden lassen, besteht die Aufgabe der Symmetrielehre darin, für jede Normalschwingung die Richtung des entstehenden Moments anzugeben, wie das schon BREWSTER (4) getan hat. Eine entsprechende zusätzliche Aussage über die Ramanlinien bezieht sich auf den Depolarisationsgrad des gestreuten Lichts.

Nach dem Schwerpunktssatz können Systeme, die nur aus Teilchen von einheitlicher Masse und Ladung aufgebaut sind, keine infrarotaktiven Schwingungen ausführen, während für ein völlig unsymmetrisches Gebilde (Punktsymmetriegruppe C_1) sämtliche Schwingungen aktiv werden. Dieser Sachverhalt führt aber auf das Problem der Besetzung der Punktlagen. Und da ist festzuhalten, dass die geometrische Gleichwertigkeit nicht nur eine Angelegenheit der Anordnung ist, sondern dass zwei Punkte für ihr Schwingungsverhalten nur dann gleichwertig sein können, wenn sie von Teilchen besetzt sind, die bezüglich Masse, Ladung und Zustand übereinstimmen. Es können demnach nur dieselben Isotopen derselben Atomart in einer Punktlage auftreten; dagegen ist es sehr wohl möglich, dass eine Atomsorte mehrere ungleichwertige Punktlagen besetzt, was dann allerdings auf verschiedene Zustände des Atoms hindeutet. Übrigens wird durch unsymmetrische Substitution von Isotopen an einem Molekül auch die Regel durchbrochen, dass im allgemeinen die Achsen des Polarisierbarkeitsellipsoids mit denen des Träg-



heitsellipsoids zusammenfallen: das Trägheitsellipsoid wird durch eine solche Substitution verändert, die Ladungsverteilung, welche die Polarisierbarkeit bestimmt, dagegen nicht.

In den Tabellen III sind nun für alle Punktsymmetriegruppen endlicher Ordnung die sämtlichen Angaben zur Bestimmung der Normalschwingungen und ihrer Beobachtbarkeit zusammengestellt. Darin sind als R die Zyklensymbole der möglichen Symmetrieoperationen angegeben, wobei f_x reine Drehung, s_x Drehinversion und s'_x Drehspiegelung um einen Winkel $\frac{2\pi}{x}$ darstellt. Die k-Werte geben an, wie oft die Operationen in einer Punktsymmetriegruppe enthalten sind, und N ist die Ordnung

Tabelle III. 1. *Digonale Gruppen* (ohne entartete Schwingungen)

R:	f_1	$f_2^{(z)}$	$f_2^{(x)}$	$f_2^{(y)}$	s_2'	$s_2^{(z)}$	$s_2^{(x)}$	$s_2^{(y)}$	N
k (C_1)	1	0	0	0	0	0	0	0	1
k (C_i)	1	0	0	0	1	0	0	0	2
k (C_s)	1	0	0	0	0	1	0	0	2
k (C_2)	1	1	0	0	0	0	0	0	2
k (C_{2h})	1	1	0	0	1	1	0	0	4
k (C_{2v})	1	1	0	0	0	0	1	1	4
k (D_2)	1	1	1	1	0	0	0	0	4
k (D_{2h})	1	1	1	1	1	1	1	1	8
c	3	−1	−1	−1	−3	1	1	1	
c′	6	2	2	2	6	2	2	2	ϵ
χ (A1)	1	1	1	1	1	1	1	1	1
χ (A2)	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	1
χ (A3)	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1	1
χ (A4)	1	1	−1	−1	−1	−1	1	1	1
χ (B1)	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1
χ (B2)	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1	1
χ (B3)	1	−1	−1	1	1	−1	−1	1	1
χ (B4)	1	−1	−1	1	−1	1	1	−1	1
u′	= u − 2				= u				Z
u	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	2	2	0	0	0	0	2	2	
	2	0	2	0	0	2	0	2	2
	2	0	0	2	0	2	2	0	
	4	0	0	0	0	4	0	0	
	4	0	0	0	0	0	4	0	4
	4	0	0	0	0	0	0	4	
	8	0	0	0	0	0	0	0	8

Beziehungen:

$C_i = S_2'$
$C_s = S_2$
$C_{2h} = C_{2i} = S_{2v}'$
$C_{2v} = S_{2v}$
$D_{2h} = D_{2i} = D_{2v}$

Schwingungstypen (Restsymmetrie):

C_1	C_i	C_s	C_2	C_{2h}	C_{2v}	D_2	D_{2h}
A (C_1)	A_g (C_i)	A′ (C_s)	A (C_2)	A_g (C_{2h})	A′ (C_{2v})	A_1 (D_2)	A_{1g} (D_{2h})
= =	A_u (C_1)	A″ (C_1)	= =	A_u (C_2)	A″ (C_2)	= =	A_{1u} (D_2)
= =	= =	= =	= =	= =	= =	A_2 (C_2)	A_{2g} (C_{2h})
= =	= =	= =	= =	= =	= =	= =	A_{2u} (C_{2v})
= =	= =	= =	B (C_1)	B_g (C_i)	B′ (C_s)	B_1 (C_2')	B_{1g} (C_{2h}')
= =	= =	= =	= =	B_u (C_s)	B″ (C_s')	= =	B_{1u} (C_{2v}')
= =	= =	= =	= =	= =	= =	B_2 (C_2'')	B_{2g} (C_{2h}'')
= =	= =	= =	= =	= =	= =	= =	B_{2u} (C_{2v}'')

Punktlagen:

C_1	C_i	C_s	C_2	C_{2h}	C_{2v}	D_2	D_{2h}
—		C_1	—	C_2	—	$C_2^{(z)}$	$C_{2v}^{(z)}$
—	C_1	—	C_1	C_s	$C_s^{(y)}$	$C_2^{(x)}$	$C_{2v}^{(x)}$
—		—			$C_s^{(x)}$	$C_2^{(y)}$	$C_{2v}^{(y)}$
—	—	—	—	—	C_1		$C_s^{(z)}$
—	—	—	—	C_1	—	C_1	$C_s^{(x)}$
—	—	—	—		—		$C_s^{(y)}$
—	—	—	—	—	—	—	C_1

2. *Wirtelige Gruppen* (mit trennbar entarteten Doppelschwingungen)

R:	f_1	f_m x	$f_2^{\parallel}$	f_n x	$f_2^{\parallel}$	f_p x	$(f_2^{\parallel})$	s_2'	s_m x	$s_2^{\perp}$	s_n x	$s_2^{\perp}$	s_n' x	$s_2^{\perp}$	N
k (C_p)	1	je 0	0	je 0	0	je 2	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	p
k (C_n)	1	je 0	0	je 2	1	je 0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	n
k (C_m)	1	je 2	1	je 0	0	je 0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	m
k (S_m)	1	0, 2, 0, 2, . . 0	1	je 0	0	je 0	0	0	2, 0, 2, 0, . . 2	0	je 0	0	je 0	0	m
k (C_{pi})	1	je 0	0	je 0	0	je 2	0	1	je 0	0	je 0	0	2, 0, 2, 0, . . 0	0	2 p
k (C_{ph})	1	je 0	0	je 0	0	je 2	0	0	je 0	0	2, 0, 2, 0, . . 0	0	je 0	1	=n
k (C_{nh})	1	je 0	0	je 2	1	je 0	0	1	je 0	0	2, 0, 2, 0, . . 0	1	2, 0, 2, 0, . . 0	0	2 n = m
k (C_{mh})	1	je 2	1	je 0	0	je 0	0	1	je 2	1	je 0	0	je 0	0	2 m
c	3	$2\cos\frac{2\pi x}{m}+1$	−1	$2\cos\frac{2\pi x}{n}+1$	−1	$2\cos\frac{2\pi x}{p}+1$	−1	−3	$2\cos\frac{2\pi x}{m}-1$	1	$2\cos\frac{2\pi x}{n}-1$	1	$2\cos\frac{2\pi x}{p}-1$	1	
c′	6	$4\cos^2\frac{2\pi x}{m}+2\cos\frac{2\pi x}{m}$	2	$4\cos^2\frac{2\pi x}{n}+2\cos\frac{2\pi x}{n}$	2	$4\cos^2\frac{2\pi x}{p}+2\cos\frac{2\pi x}{p}$	2	6	$4\cos^2\frac{2\pi x}{m}-2\cos\frac{2\pi x}{m}$	2	$4\cos^2\frac{2\pi x}{n}-2\cos\frac{2\pi x}{n}$	2	$4\cos^2\frac{2\pi x}{p}-2\cos\frac{2\pi x}{p}$	2	ε
χ (A1)	1	je 1	1	je 1	1	je 1	—	1	je 1	1	je 1	1	je 1	1	1
χ (A2)	1	je 1	1	je 1	1	je 1	—	−1	je −1	−1	je −1	−1	je −1	−1	1
χ (B1)	1	−1, 1, −1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−1	keine	—	1	−1, 1, −1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−1	1, −1, 1, . . −1	−	1
χ (B2)	1	−1, 1, −1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−1	B-Typen	—	−1	1, −1, 1, . . 1	−1	1, −1, 1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−	1
χ (E1)	2	$2\cos(x\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{n})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{p})$	—	2	$2\cos(x\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{n})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{p})$	2	1
χ (E2)	2	$2\cos(x\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{n})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{p})$	—	−2	$-2\cos(x\frac{2\pi}{m})$	2	$-2\cos(x\frac{2\pi}{n})$	2	$-2\cos(x\frac{2\pi}{p})$	−2	1
χ (E3)	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{m})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{p})$	—	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{m})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{p})$	2	1
χ (E4)	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{m})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{p})$	—	−2	$-2\cos(2x\frac{2\pi}{m})$	−2	$-2\cos(2x\frac{2\pi}{n})$	−2	$-2\cos(2x\frac{2\pi}{p})$	−2	1
.	.	.	—	.	—	.	.	+	+	−	+	−	+	+	.
.	.	.	—	.	—	.	.	—	−	+	−	+	−	−	.
.	.	.	+	.	+	.	.	.	.	+	.	+	.	.	.
.	.	.	+	.	+	.	.	.	.	−	.	−	.	.	.
χ (Ei)	2	$2\cos(y x\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(y x\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(y x\frac{2\pi}{p})$	—	2	$2\cos(y x\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(y x\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(y x\frac{2\pi}{p})$	2	1
χ (Ej)	2	$2\cos(y x\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(y x\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(y x\frac{2\pi}{p})$	—	−2	$-2\cos(y x\frac{2\pi}{m})$	2	$-2\cos(y x\frac{2\pi}{n})$	−2	$-2\cos(y x\frac{2\pi}{p})$	−2	1
x, y = 1, 2 . .	—	$\frac{1}{2}m-1$	—	$\frac{1}{2}n-1$	—	$\frac{1}{2}(p-1)$	—	—	$\frac{1}{2}m-1$	−	$\frac{1}{2}n-1$	−	$\frac{1}{2}n-1$	−	
u′				=u−2							=u				Z
u	1	je 1	1	je 1	1	je 1	—	1	je 1	1	je 1	1	je 1	1	1
	2	je 2	2	je 2	2	je 2	—	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	2
	p	je 0	0	je 0	0	je 0	—	0	je 0	0	je 0	0	je 0	p	p
	n	je 0	0	je 0	0	je 0	—	0	je 0	0	je 0	n	je 0	0	n
	m	je 0	0	je 0	0	je 0	—	0	je 0	m	je 0	0	je 0	0	m
	2 m	je 0	0	je 0	0	je 0	—	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	2 m

Beziehungen:

$S_m = S_m'$
$C_{pi} = S_p = S_n'$
$C_{ph} = S_p' = S_n$
$C_{nh} = C_{ni}$
$C_{mh} = C_{mi}$

Für lineare Konfigurationen eine Al-Schwingung mehr!

Schwingungstypen (Restsymmetrie):

ε	C_p	C_n	C_m	S_m	C_{pi}	C_{ph}	C_{nh}	C_{mh}
1	A (C_p)	A (C_n)	A (C_m)	A (S_m)	A_g (C_{pi})	A′ (C_{ph})	A_g (C_{nh})	A_g (C_{mh})
1	= =	= =	= =	B (C_n)	A_u (C_p)	A″ (C_p)	A_u (C_n)	A_u (C_m)
1		B (C_p)	B (C_n)	= =			B_g (C_{pi})	B_g (C_{nh})
1		= =	= =	= =			B_u (C_{ph})	B_u (S_m)
1	$\underline{E_1}$ (C_1)	$\underline{E_1}$ (C_1)	$\underline{E_1}$ (C_1)	$\underline{E_1}$ (C_1)	$\underline{E_{1g}}$ (C_i)	$\underline{E_1'}$ (C_s)	$\underline{E_{1g}}$ (C_i)	$\underline{E_{1g}}$ (C_i)
1	= =	= =	= =	$\underline{E_2}$ (C_1')	$\underline{E_{1u}}$ (C_1)	$\underline{E_1''}$ (C_1)	$\underline{E_{1u}}$ (C_s)	$\underline{E_{1u}}$ (C_s)
1	$\underline{E_2}$ (C_1')	$\underline{E_2}$ (C_2)	$\underline{E_2}$ (C_2)	$\underline{E_3}$ (C_2)	$\underline{E_{2g}}$ (C_i')	$\underline{E_2'}$ (C_s')	$\underline{E_{2g}}$ (C_{2h})	$\underline{E_{2g}}$ (C_{2h})
1	= =	= =	= =	$\underline{E_4}$ (C_2')	$\underline{E_{2u}}$ (C_1')	$\underline{E_2''}$ (C_1')	$\underline{E_{2u}}$ (C_2)	$\underline{E_{2u}}$ (C_2)
.	.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.	.
1	$\underline{E_y}$ (C_1'')	$\underline{E_y}$ (C_2')	$\underline{E_y}$ (C_1')	= =	$\underline{E_{yg}}$ (C_i'')	$\underline{E_y'}$ (C_s'')	$\underline{E_{yg}}$ (C_{2h}')	$\underline{E_{yg}}$ (C_i')
1	= =	= =	= =	= =	$\underline{E_{yu}}$ (C_1'')	$\underline{E_y''}$ (C_1'')	$\underline{E_{yu}}$ (C_2')	$\underline{E_{yu}}$ (C_s')

Punktlagen:

Z	C_p	C_n	C_m	S_m	C_{pi}	C_{ph}	C_{nh}	C_{mh}
1	C_p	C_n	C_m	S_m	C_{pi}	C_{ph}	C_{nh}	C_{mh}
2	—	—	—	C_n	C_p	C_p	C_n	C_m
p	C_1	—	—	—	—	C_s	—	—
n	—	C_1	—	—	C_1	C_1	C_s	—
m	—	—	C_1	C_1	—	—	C_1	C_s
2 m	—	—	—	—	—	—	—	C_1

Leere Seite
Blank page
Page vide

3. *Wirtelige Gruppen* (mit untrennbar entarteten Doppelschwingungen)

R:	f_1	f_m / x	$f_2^{\parallel}$	f_n / x	$f_2^{\parallel}$	f_p / x	$(f_2^{\parallel})$	$f_2^{\perp}$	$f_2^{\perp\prime}$	s_2'	s_m / x	$s_2^{\perp}$	s_n / x	$s_2^{\perp}$	s_n' / x	$s_2^{\perp}$	$s_2^{\parallel}$	$s_2^{\parallel\prime}$	N
k (C_{pv})	1	je 0	0	je 0	0	je 2	0	0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	p	0	2 p
k (C_{nv})	1	je 0	0	je 2	1	je 0	0	0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	$\frac{1}{2}$n	$\frac{1}{2}$n	2 n
k (C_{mv})	1	je 2	1	je 0	0	je 0	0	0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	$\frac{1}{2}$m	$\frac{1}{2}$m	2 m
k (D_p)	1	je 0	0	je 0	0	je 2	0	p	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	0	0	2 p
k (D_n)	1	je 0	0	je 2	1	je 0	0	$\frac{1}{2}$n	$\frac{1}{2}$n	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	0	0	2 n
k (D_m)	1	je 2	1	je 0	0	je 0	0	$\frac{1}{2}$m	$\frac{1}{2}$m	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	0	0	2 m
k (D_{pd})	1	je 0	0	je 0	0	je 2	0	p	0	1	je 0	0	je 0	0	2, 0, 2, 0, . . 0	0	p	0	4 p
k (D_{nd})	1	je 0	0	je 2	1	je 0	0	$\frac{1}{2}$n	$\frac{1}{2}$n	0	2, 0, 2, 0, . . 2	0	je 0	0	je 0	0	$\frac{1}{2}$n	$\frac{1}{2}$n	4 n
k (D_{ph})	1	je 0	0	je 0	0	je 2	0	p	0	0	je 0	0	2, 0, 2, 0, . . 0	0	je 0	1	0	p	4 p
k (D_{nh})	1	je 0	0	je 2	1	je 0	0	$\frac{1}{2}$n	$\frac{1}{2}$n	1	je 0	0	2, 0, 2, 0, . . 0	1	2, 0, 2, 0, . . 0	0	$\frac{1}{2}$n	$\frac{1}{2}$n	4 n
k (D_{mh})	1	je 2	1	je 0	0	je 0	0	$\frac{1}{2}$m	$\frac{1}{2}$m	1	je 2	1	je 0	0	je 0	0	$\frac{1}{2}$m	$\frac{1}{2}$m	4 m
c	3	$2\cos\frac{2\pi x}{m}+1$	−1	$2\cos\frac{2\pi x}{n}+1$	−1	$2\cos\frac{2\pi x}{p}+1$	−1	−1	−1	−3	$2\cos\frac{2\pi x}{m}-1$	1	$2\cos\frac{2\pi x}{n}-1$	1	$2\cos\frac{2\pi x}{p}-1$	1	1	1	
c′	6	$4\cos^2\frac{2\pi x}{m}+2\cos\frac{2\pi x}{m}$	2	$4\cos^2\frac{2\pi x}{n}+2\cos\frac{2\pi x}{n}$	2	$4\cos^2\frac{2\pi x}{p}+2\cos\frac{2\pi x}{p}$	2	2	2	6	$4\cos^2\frac{2\pi x}{m}-2\cos\frac{2\pi x}{m}$	2	$4\cos^2\frac{2\pi x}{n}-2\cos\frac{2\pi x}{n}$	2	$4\cos^2\frac{2\pi x}{p}-2\cos\frac{2\pi x}{p}$	2	2	2	ϵ
χ (A1)	1	je 1	1	je 1	1	je 1	−	1	1	1	je 1	1	je 1	1	je 1	1	1	1	1
χ (A2)	1	je 1	1	je 1	1	je 1	−	1	1	−1	je −1	−1	je −1	−1	je −1	−1	−1	−1	1
χ (A3)	1	je 1	1	je 1	1	je 1	−	−1	−1	1	je 1	1	je 1	1	je 1	1	−1	−1	1
χ (A4)	1	je 1	1	je 1	1	je 1	−	−1	−1	−1	je −1	−1	je −1	−1	je −1	−1	1	1	1
χ (B1)	1	−1, 1, −1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−1	keine	−	1	1	1	−1, 1, −1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−1	1, −1, 1, . . −1	−	1	−1	1
χ (B2)	1	−1, 1, −1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−1		−	1	1	−1	1, −1, 1, . . 1	−1	1, −1, 1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−	−1	1	1
χ (B3)	1	−1, 1, −1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−1	B-Typen	−	−1	−1	1	−1, 1, −1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−1	1, −1, 1, . . −1	−	−1	1	1
χ (B4)	1	−1, 1, −1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−1		−	−1	−1	−1	1, −1, 1, . . 1	−1	1, −1, 1, . . −1	1	−1, 1, −1, . . 1	−	1	−1	1
χ (E1)	2	$2\cos(x\frac{2\pi}{n})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{p})$	−	0	0	2	$2\cos(x\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{n})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{p})$	2	0	0	2
χ (E2)	2	$2\cos(x\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{n})$	−2	$2\cos(x\frac{2\pi}{p})$	−	0	0	−2	$-2\cos(x\frac{2\pi}{m})$	2	$-2\cos(x\frac{2\pi}{n})$	2	$-2\cos(x\frac{2\pi}{p})$	−2	0	0	2
χ (E3)	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{m})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{p})$	−	0	0	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{m})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{p})$	2	0	0	2
χ (E4)	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{m})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(2x\frac{2\pi}{p})$	−	0	0	−2	$-2\cos(2x\frac{2\pi}{m})$	−2	$-2\cos(2x\frac{2\pi}{n})$	−2	$-2\cos(2x\frac{2\pi}{p})$	−2	0	0	2
.	.	.	−	.	−	.	.	.	.	+	+	−	+	−	+	+	.	.	.
.	.	.	−	.	−	.	.	.	.	−	−	+	−	+	−	−	.	.	.
.	.	.	+	.	+	.	.	.	.	.	.	+	.	+	.	.	.	.	.
.	.	.	+	.	+	.	.	.	.	.	.	−	.	−	.	.	.	.	.
χ (Ei)	2	$2\cos(yx\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(yx\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(yx\frac{2\pi}{p})$	−	0	0	2	$2\cos(yx\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(yx\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(yx\frac{2\pi}{p})$	2	0	0	2
χ (Ej)	2	$2\cos(yx\frac{2\pi}{m})$	−2	$2\cos(yx\frac{2\pi}{n})$	2	$2\cos(yx\frac{2\pi}{p})$	−	0	0	−2	$-2\cos(yx\frac{2\pi}{m})$	2	$-2\cos(yx\frac{2\pi}{n})$	−2	$-2\cos(yx\frac{2\pi}{p})$	−2	0	0	2
x, y = 1, 2 . .	−	$\frac{1}{2}$m − 1	−	$\frac{1}{2}$n − 1	−	$\frac{1}{2}$(p − 1)	−	−	−	−	$\frac{1}{2}$m − 1	−	$\frac{1}{2}$n − 1	−	$\frac{1}{2}$(p − 1)	−	−	−	
u′				= u − 2									= u						Z
u	1	je 1	1	je 1	1	je 1	−	1	1	1	je 1	1	je 1	1	je 1	1	1	1	1
	2	je 2	2	je 2	2	je 2	−	0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	2	2	2
	p	je 0	0	je 0	0	je 0	−	1	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	p	1	1	p
	n	je 0	0	je 0	0	je 0	−	2	0	0	je 0	0	je 0	n	je 0	0	0	2	n
	n	je 0	0	je 0	0	je 0	−	0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	0	2	
	n	je 0	0	je 0	0	je 0	−	0	2	0	je 0	0	je 0	n	je 0	n	2	0	
	m	je 0	0	je 0	0	je 0	−	2	0	0	je 0	m	je 0	0	je 0	0	2	0	m
	m	je 0	0	je 0	0	je 0	−	0	2	0	je 0	m	je 0	0	je 0	0	0	2	
	m	je 0	0	je 0	0	je 0	−	0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	0	4	
	m	je 0	0	je 0	0	je 0	−	0	0	0	je 0	0	je 0	m	je 0	0	0	0	
	m	je 0	0	je 0	0	je 0	−	0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	4	0	
	m	je 0	0	je 0	0	je 0	−	0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	2	2	
	m	je 0	0	je 0	0	je 0	−	2	2	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	0	0	
	2 m	je 0	0	je 0	0	je 0	−	0	0	0	je 0	2 m	je 0	0	je 0	0	0	0	
	2 m	je 0	0	je 0	0	je 0	−	0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	4	0	2m
	2 m	je 0	0	je 0	0	je 0	−	0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	0	4	
	4 m	je 0	0	je 0	0	je 0	−	0	0	0	je 0	0	je 0	0	je 0	0	0	0	4m

Beziehungen:

$D_{pd} = D_{pl} = S_{pv} = S'_{nv}$
$D_{nd} = S_{nv} = S'_{mv}$
$D_{ph} = D_{pv} = S'_{pv} = S_{nv}$
$D_{nh} = D_{nl} = D'_{nv}$
$D_{md} = D_{mh} = D_{ml} = D_{mv}$

Für lineare Konfigurationen eine A 3-Schwingung mehr!

Schwingungstypen (Restsymmetrie):

C_{pv}	C_{nv}	C_{mv}	D_p	D_n	D_m	D_{pd}	D_{nd}	D_{ph}	D_{nh}	D_{mh}
A′ (C_{pv})	A′ (C_{nv})	A′ (C_{mv})	A_1 (D_p)	A_1 (D_n)	A_1 (D_m)	A_{1g} (D_{pd})	A_1' (D_{nd})	A_1' (D_{ph})	A_{1g} (D_{nh})	A_{1g} (D_{mh})
A″ (C_p)	A″ (C_n)	A″ (C_m)	= =	= =	= =	A_{1u} (D_p)	A_1'' (D_n)	A_1'' (D_p)	A_{1u} (D_n)	A_{1u} (D_m)
= =	= =	= =	A_2 (C_p)	A_2 (C_n)	A_2 (C_m)	A_{2g} (C_{pl})	A_2'' (S_m)	A_2' (C_{ph})	A_{2g} (C_{nh})	A_{2g} (C_{mh})
= =	= =	= =	= =	= =	= =	A_{2u} (C_{pv})	A_2' (C_{nv})	A_2'' (C_{pv})	A_{2u} (C_{nv})	A_{2u} (C_{mv})
	B′ (C_{pv})	B′ (C_{nv})		B_1 (D_p)	B_1 (D_n)		= =		B_{1g} (D_{pd})	B_{1g} (D_{nh})
	B″ (C_{pv}')	B″ (C_{nv}')		= =	= =		= =		B_{1u} (D_{ph})	B_{1u} (D_{nd})
	= =	= =		B_2 (D_p')	B_2 (D_n')		= =		B_{2g} (D_{pd}')	B_{2g} (D_{nh}')
	= =	= =		= =	= =		= =		B_{2u} (D_{ph}')	B_{2u} (D_{nd}')
E_1 (C_1)	E_1 (C_1)	E_1 (C_1)	E_1 (C_1)	E_1 (C_1)	E_1 (C_1)	E_{1g} (C_i)	E_1' (C_1)	E_1' (C_s)	E_{1g} (C_i)	E_{1g} (C_i)
= =	= =	= =	= =	= =	= =	E_{1u} (C_1)	E_1'' (C_1')	E_1'' (C_1)	E_{1u} (C_s)	E_{1u} (C_s)
E_2 (C_1')	E_2 (C_2)	E_2 (C_2)	E_2 (C_1')	E_2 (C_2)	E_2 (C_2)	E_{2g} (C_i')	E_2' (C_2)	E_2' (C_s)	E_{2g} (C_{2h})	E_{2g} (C_{2h})
= =	= =	= =	= =	= =	= =	E_{2u} (C_1')	E_2'' (C_2')	E_2'' (C_1)	E_{2u} (C_2)	E_{2u} (C_2)
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
E_y (C_1'')	E_y (C_2')	E_y (C_1')	E_y (C_1'')	E_y (C_2')	E_y (C_1')	= =	= =	E_y' (C_s)	E_{yg} (C_{2h})	E_{yg} (C_i)
= =	= =	= =	= =	= =	= =	= =	= =	E_y'' (C_1)	E_{yu} (C_2)	E_{yu} (C_s)

Punktlagen:

C_{pv}	C_{nv}	C_{mv}	D_p	D_n	D_m	D_{pd}	D_{nd}	D_{ph}	D_{nh}	D_{mh}
C_{pv}	C_{nv}	C_{mv}	D_p	D_n	D_m	D_{pd}	D_{nd}	D_{ph}	D_{nh}	D_{mh}
—	—	—	C_p	C_n	C_m	C_{pv}	C_{nv}	C_{pv}	C_{nv}	C_{mv}
C_s	—	—	C_2	—	—	—	—	C_{2v}	—	—
} C_1	} C_s'	—	—	C_2	—	C_2	—	—	C_{2v}	—
		—	} C_1	—	—	—	—	$C_s^{\parallel}$	—	—
		—		C_2'	—	C_s	—	$C_s^{\perp}$	C_{2v}'	—
—	C_s	—		—	C_2	—	—	—	—	C_{2v}
—	—	C_s'	—	—	C_2'	} C_1	—	—	—	C_{2v}'
—	—	—	—	} C_1	—		—	—	$C_s^{\parallel\prime}$	—
—	C_1	—	—		—		—	} C_1	$C_s^{\perp}$	—
—	—	—	—		—	—	—		$C_s^{\parallel}$	—
—	—	—	—		—	—	C_s	—	—	—
—	C_1	—	—	—	—	—	C_2	—	—	—
—	—	C_1	—	—	} C_1	—	C_1	—	C_1	$C_s^{\perp}$
—	—	—	—	—		—	—	—	—	$C_s^{\parallel}$
—	—	—	—	—		—	—	—	—	$C_s^{\parallel\prime}$
—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	C_1

Leere Seite
Blank page
Page vide

4. *Kubische Gruppen* (mit dreifach entarteten Schwingungen)

R:	f_1	f_4	$f_2^{(H)}$	f_3	$f_2^{(N)}$	s_2'	s_4	$s_2^{(H)}$	s_6'	$s_2^{(N)}$	N	Schwingungstypen (Restsymmetrie):				
k (T)	1	0	3	8	0	0	0	0	0	0	12					
k (T_h)	1	0	3	8	0	1	0	3	8	0	24					
k (T_d)	1	0	3	8	0	0	6	0	0	6	24					
k (O)	1	6	3	8	6	0	0	0	0	0	24					
k (O_h)	1	6	3	8	6	1	6	3	8	6	48					
c	3	1	−1	0	−1	−3	−1	1	0	1						
c′	6	0	2	0	2	6	0	2	0	2	ϵ	T	T_h	T_d	O	O_h
χ (A1)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	A (T)	A_g (T_h)	A′ (T_d)	A_1 (O)	A_{1g} (O_h)
χ (A2)	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	1	= =	A_u (T)	A″ (T)	= =	A_{1u} (O)
χ (A3)	1	−1	1	1	−1	1	−1	1	1	−1	1	= =	= =	= =	A_2 (T)	A_{2g} (T_h)
χ (A4)	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1	1	= =	= =	= =	= =	A_{2u} (T_d)
χ (E1)	2	0	2	−1	0	2	0	2	−1	0	1	E (D_2)	E_g (D_{2h})			
χ (E2)	2	0	2	−1	0	−2	0	−2	1	0	1	= =	E_u (D_2)			
χ (E1)	2	0	2	−1	0	2	0	2	−1	0	2			E (D_2)	E (D_2)	E_g (D_{2h})
χ (E2)	2	0	2	−1	0	−2	0	−2	1	0	2			= =	= =	E_u (D_2)
χ (F1)	3	1	−1	0	−1	3	1	−1	0	−1	3	F (C_1)	F_g (C_i)	F_1 (C_1)	F_1 (C_1)	F_{1g} (C_i)
χ (F2)	3	1	−1	0	−1	−3	−1	1	0	1	3	= =	F_u (C_1)	F_2 (C_1')	= =	F_{1u} (C_1)
χ (F3)	3	−1	−1	0	1	3	−1	−1	0	1	3	= =	= =	= =	F_2 (C_1')	F_{2g} (C_i')
χ (F4)	3	−1	−1	0	1	−3	1	1	0	−1	3	= =	= =	= =	= =	F_{2u} (C_1')
u′	= u − 2					= u					Z	Punktlagen:				
u	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	T	T_h	T_d	O	O_h
	4	0	0	1	0	0	0	0	0	2	4	C_3	—	C_{3v}	—	—
	6	2	2	0	0	0	0	4	0	2	6	C_2	C_{2v}	C_{2v}	C_4	C_{4v}
	8	0	0	2	0	0	0	0	0	4	8	—	C_3	—	C_3	C_{3v}
	12	0	0	0	2	0	0	4	0	2	12	C_1	C_s	C_s	C_2	C_{2v}
	24	0	0	0	0	0	0	8	0	0	24	—	—	C_1	C_1	$C_s^{(H)}$
	24	0	0	0	0	0	0	0	0	4		—	C_1	—		$C_s^{(N)}$
	48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	48	—	—	—	—	C_1

5. *Ikosaedrische Gruppen* (mit fünffach entarteten Schwingungen)

R:	f_1	f_5^1	f_5^2	f_3	f_2	s_2'	s_{10}'	s_{10}	s_6'	s_2	N	Schwingungstypen (Restsymmetrie):	
k (I)	1	12	12	20	15	0	0	0	0	0	60		
k (I_h)	1	12	12	20	15	1	12	12	20	15	120		
c	3	$\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$	0	−1	−3	$-\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$	$-\frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$	0	1			
c'	6	1	1	0	2	6	1	1	0	2	ϵ	I	I_h
χ (A1)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	A (I)	A_g (I_h)
χ (A2)	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	1	= =	A_u (I)
χ (F1)	3	$\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$	0	−1	3	$\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$	0	−1	3	F_1 (C_1)	F_{1g} (C_i)
χ (F2)	3	$\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$	0	−1	−3	$-\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$	$-\frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$	0	1	3	= =	F_{1u} (C_1)
χ (F3)	3	$\frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$	0	−1	3	$\frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$	0	−1	3	F_2 (C_1')	F_{2g} (C_i')
χ (F4)	3	$\frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$	0	−1	−3	$-\frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$	$-\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$	0	1	3	= =	F_{2u} (C_1')
χ (G1)	4	−1	−1	1	0	4	−1	−1	1	0	4	G (C_1)	G_g (C_i)
χ (G2)	4	−1	−1	1	0	−4	1	1	−1	0	4	= =	G_u (C_1)
χ (H1)	5	0	0	−1	1	5	0	0	−1	1	5	H (C_1)	H_g (C_i)
χ (H2)	5	0	0	−1	1	−5	0	0	1	−1	5	= =	H_u (C_1)
u'		= u − 2					= u				Z	Punktlagen:	
u	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	I	I_h
	12	2	2	0	0	0	0	0	0	4	12	C_5	C_{5v}
	20	0	0	2	0	0	0	0	0	4	20	C_3	C_{3v}
	30	0	0	0	2	0	0	0	0	4	30	C_2	C_{2v}
	60	0	0	0	0	0	0	0	0	4	60	C_1	C_s
	120	0	0	0	0	0	0	0	0	0	120	—	C_1

der Gruppe. Es folgen als c und c′ die Grössen, die für das Verhalten von Vektoren bzw. Tensoren gegenüber den Symmetrieoperationen charakteristisch sind. Eine allgemeine Zusammenstellung derartiger Grössen findet man bei BHAGAVANTAM und SURYANARAYANA (3). Im vorliegenden Falle ist $c = 2\cos\varphi \pm 1$, $c' = 4\cos^2\varphi \pm 2\cos\varphi$, wo φ den Drehwinkel bedeutet und das obere Vorzeichen für Symmetrieoperationen I. Art, das untere für Operationen II. Art zu nehmen ist. Der Verlauf dieser Funktionen geht aus der Figur hervor.

Den Kern der Tabellen macht die eigentliche Charakterentafel aus, die für die laufend numerierten Schwingungsklassen die Charaktere χ und die zugehörigen Entartungsfaktoren ϵ angibt; in ihr kommt das Verhalten der Schwingungen zu den Symmetrieelementen zum Ausdruck. Daneben sind für die einzelnen Punktsymmetriegruppen die möglichen Schwingungstypen in ihrer üblichen Bezeichnung und mit Angabe der Restsymmetrien aufgeführt. Zwei Gleichheitszeichen bedeuten, dass der betreffende Typ mit einem bereits angegebenen zusammenfällt und nicht mehr in Rechnung zu stellen ist. Das ist dann der Fall, wenn sich die Charaktere bezüglich der Symmetrieelemente mit $k \neq 0$ nicht unterscheiden. Schliesslich sind darunter alle möglichen Punktlagen mit ihren Symmetriebedingungen und Zähligkeiten Z zusammengestellt: ihnen entsprechen die Anzahlen u der Punkte, die auf den einzelnen Symmetrieelementen liegen und deshalb gegenüber der zugehörigen Transformation invariant sind. Die Werte u′, die beim Abzug der uneigentlichen Schwingungen eine Rolle spielen, sind für Operationen I. Art um 2 niedriger als u; für Operationen II. Art fallen sie mit den u zusammen.

In den Tabellen für die wirteligen Punktsymmetriegruppen sind übrigens von den zur Hauptachse gehörigen Zyklen nur die zweizähligen gesondert aufgeführt. Alle übrigen werden erhalten, indem man x bis zur angegebenen Grenze laufen lässt. Die Charaktere der entarteten Schwingungen kommen dann heraus, wenn y dieselben Werte durchläuft. m, n und p haben die gleiche Bedeutung wie in Tabelle I.

Zwischen den Grössen der Tabellen III gelten mannigfache Beziehungen, etwa innerhalb der eigentlichen Charakterentafel die, welche aus den Orthogonalitätseigenschaften folgen. Das Verhalten der gesamten Punktsymmetriegruppe wird aber durch diejenigen Ausdrücke beschrieben, in denen über alle Symmetriezyklen der Gruppe summiert wird, und die sich deshalb in die Form $\frac{1}{N}\sum_{R}(k\Phi)_R$ bringen lassen, wo für Φ beliebige Funktionen eingesetzt werden können.

a) Für jede Punktsymmetriegruppe gilt:

(1) $\frac{1}{N}\sum_R k_R = 1$

(2) $\frac{1}{N}\sum_R (kc)_R$ = Zahl der Freiheitsgrade für den Symmetriehauptpunkt ($Z = 1$)

(3) $\frac{1}{N}\sum_R (kc')_R$ = 1 für isometrische (kubische, ikosaedrische)
2 für wirtelige
3 für orthorhombische
4 für monokline
6 für trikline Punktgruppen

b) Für jede Punktlage in einer Gruppe gilt:

(4) $\frac{1}{N}\sum_R (ku)_R = 1$

(5) $\frac{1}{N}\sum_R (kcu)_R$ = Zahl der Freiheitsgrade für die Punktlage selbst

c) Für jede Schwingungsklasse in einer Gruppe gilt:

(6) $\frac{1}{N}\sum_R (k\chi)_R$ = 1 für die (totalsymmetrische) Hauptdarstellung A 1
0 für alle übrigen Klassen

(7) $\frac{1}{N}\sum_R (k\chi^2\epsilon)_R$ = 1 für symmetrische und antisymmetrische Klassen A und B
2 für Doppelschwingungen $\underline{E}$ und E
3 für dreifach entartete Klassen F
4 für vierfach entartete Klassen G
5 für fünffach entartete Klassen H

(8) $\frac{1}{N}\sum_R (kc\chi)_R$ $\neq$ 0 für infrarot-aktive Schwingungsklassen
= 0 für infrarot inaktive Schwingungsklassen

(9) $\frac{1}{N}\sum_R (kc'\chi)_R$ $\neq$ 0 für im Ramaneffekt erlaubte Schwingungsklassen
= 0 für im Ramaneffekt verbotene Schwingungsklassen

d) Für jede Punktlage und Schwingungsklasse gilt:

(10) $\frac{1}{N}\sum_R (kc\chi u)_R$ = Zahl der Normalschwingungen (einschliesslich uneigentliche)

(11) $\frac{1}{N}\sum_R (kc\chi u')_R$ = Zahl der eigentlichen Normalschwingungen

e) Für jede Kombination von q Punktlagen und jede Klasse gilt:

(12) $\frac{1}{N}\sum_R \left((kc\chi\sum_{i=1}^{q} u_i\right)_R$ = Zahl aller Normalschwingungen

$$(13)\ \frac{N}{I}\sum_{R}\left[kc\chi\left(u_1'+\sum_{i=2}^{q}u_i\right)\right]_R = \text{Zahl der eigentlichen Normalschwingungen}$$

f) Für jede reduzible Klasse mit den Charakteren χ' gilt:

$$(14)\ \frac{1}{N}\sum_{R}(k\chi\chi')_R = \text{Zahl, wie oft sie in einer Schwingungsklasse vorkommt}$$

Die Benützung der Tabellen gestaltet sich sehr einfach, wenn man sich die Bedeutung dieser Formeln klargemacht hat. (1) ist nur ein Ausdruck dafür, dass die Anzahl verschiedener Symmetrieoperationen gleich der Ordnung der Gruppe ist. (2) teilt die Punktgruppen ein nach den Freiheitsgraden ihrer Symmetriebedingung, während (3) ein Mass für die Symmetrie des Koordinatensystems gibt. (4) ist ein anderer Ausdruck für den Satz, dass das Produkt aus Zähligkeit und geometrischer Wertigkeit einer Punktlage gleich der Ordnung der Gruppe ist; (5) verknüpft damit die Zahl der Freiheitsgrade für die Punktlage. (6) folgt aus den Orthogonalitätsbeziehungen. (7) gibt das Mass für die Entartung: seine umständliche Form beruht auf den Schwierigkeiten, die die Trennbarkeit der Doppelschwingungen $\underline{E}$ bei der Einführung des Entartungsfaktors ϵ bereitet. (8) enthält die Auswahlregel für die Beobachtbarkeit einer Schwingung im Infrarotspektrum. Die Richtung des entstehenden elektrischen Moments lässt sich dazu leicht aus dem in der Charakterentafel gegebenen Symmetrieverhalten feststellen. Die Auswahlregel für den Ramaneffekt ist in (9) enthalten. Hier sind von den beobachtbaren Schwingungen stets die totalsymmetrischen „polarisiert" (Depolarisationsgrad $\rho < 6/7$, für isometrische Gruppen $= 0$), und alle übrigen „depolarisiert" ($\rho = 6/7$). (10) bis (13) ermöglichen die Berechnung der Anzahlen von Normalschwingungen jeder Klasse für einzelne Punktlagen und Kombinationen. (13) zeigt, dass für den Abzug der uneigentlichen Schwingungen nur für eine beliebige Punktlage die u'-Werte einzusetzen sind, für alle übrigen die u-Werte. Eine Kontrolle der Ergebnisse besteht darin, dass die Gesamtzahl der eigentlichen Normalschwingungen aller Klassen den zu Beginn des Abschnitts (S. 514) angegebenen Betrag annehmen muss. Dazu sind n-fach entartete Schwingungen n-mal in Rechnung zu stellen. Soll die Untersuchung auf Kombinations- und Oberschwingungen ausgedehnt werden, so zeigt (14), in welchen Klassen die reduziblen Darstellungen dieser Schwingungen enthalten sind. Dabei ist im Falle einer Kombination der Klassen i und j $\chi_R' = (\chi_i\chi_j)_R$ und im Falle einer 1. Oberschwingung $\chi_R' = \frac{1}{2}(\chi_R^2 + \chi_{R^2})$ zu setzen mit $R^2 = f_{q/2}$, wenn R den Index q hat.

Schliesslich sind die Angaben noch für die bei linearen Konfigurationen auftretenden Zylindergruppen zu ergänzen. Endliche Zählig-

keiten liefern dort nur die Punktlagen auf der Hauptachse. Das hat zur Folge, dass trotz der unendlichen Mannigfaltigkeit von Unterachsen keine antisymmetrischen und höchstens zwei Klassen entarteter Schwingungen auftreten können. Ausserdem verliert bei Beschränkung auf die Punktlagen endlicher Zähligkeit die Unterscheidung der polaren Gruppen C_∞ und $C_{\infty v}$ sowie der unpolaren $C_{\infty h}$, D_∞ und $D_{\infty h}$ ihre Bedeutung, so dass es genügt, im Anschluss an KOHLRAUSCH (7) direkt die Eigenschaften der Normalschwingungen für $C_{\infty v}$ und $D_{\infty h}$ in Tabelle IV zusammenzustellen.

Tabelle IV.

1. Punktsymmetriegruppe $C_{\infty v}$

Punktlagen: a) $C_{\infty v}$ (Z = 1)						
Schwingungs-klasse	Symmetriezyklen f_1	f_∞	$s_2^{\parallel}$	Auswahl I.R.	Ram.	Zahl eigentlicher Normalschwingungen
A	s	s	s	$\mathfrak{M}_{\parallel}$	p	a − 1
E	s	e	–	$\mathfrak{M}_{\perp}$	dp	a − 2

2. Punktsymmetriegruppe $D_{\infty h}$

Punktlagen: a) $C_{\infty v}$ (Z = 2), b) $D_{\infty h}$ (Z = 1)									
Schwingungs-klasse	Symmetriezyklen f_1	f_∞	$f_2^{\perp}$	s_2'	$s_2^{\perp}$	$s_2^{\parallel}$	Auswahl I.R.	Ram.	Zahl eigentlicher Normalschwingungen
A_g	s	s	s	s	s	s	ia	p	a
A_u	s	s	s	as	as	as	$\mathfrak{M}_{\parallel}$	v	a + b − 1
E_g	s	e	–	s	as	–	ia	dp	a − 1
E_u	s	e	–	as	s	–	$\mathfrak{M}_{\perp}$	v	a + b − 1

s = symmetrisch, as = antisymmetrisch, e = entartet, ia = inaktiv,
p = polarisiert, dp = depolarisiert, v = verboten

IV. Der Schluß vom Schwingungsspektrum auf die Molekülstruktur

Die Berechnung der Schwingungen und ihrer Eigenschaften für eine gegebene Konfiguration lässt sich nach den Angaben des vorhergehenden Abschnittes durchaus eindeutig durchführen. Leider ist das bei der Umkehrung des Verfahrens, wie sie durch die Frage nach der Anordnung des Systems gefordert wird, nicht der Fall. Natürlich kann durch Vergleich von beobachteten und errechneten Schwingungen eine vermutete Struk-

tur widerlegt oder wahrscheinlicher gemacht werden; an dieser Stelle interessieren aber die direkten Schlüsse, die auf die Konfiguration gezogen werden können. Die Vieldeutigkeiten, die dabei im allgemeinen auf mehreren Stufen der Betrachtung entstehen, seien nun am Beispiel des Benzolmoleküls erläutert.

Die Formel C_6H_6 legt die Vermutung nahe, dass das Molekül aus $(6+6)$ gleichwertigen Teilchen aufgebaut sei. Ausserdem könnte die Konfiguration allerdings noch von Symmetriefällen vorgetäuscht werden, in denen nicht alle 6 C- und alle 6 O-Atome unter sich gleichwertig sind. Es sind dies von allen Fällen, die in Tabelle II unter der Gesamtzahl 12 auf den Fall $(6+6)$ folgen, diejenigen, deren Anzahlen sich zu zwei Gruppen von je 6 Teilchen zusammensetzen lassen, also die Fälle unter $(6+3+3)$, $(6+3+2+1)$, $(6+3+1+1+1)$, $(6+2+2+2)$, $(6+1+1+1+1+1+1)$, $(5+5+1+1)$, $(5+2+2+2+1)$, $(5+1+1+1+1+1+1+1)$, $(4+4+2+2)$ $(4+4+2+1+1)$, $(4+4+1+1+1+1)$, $(4+2+2+2+2)$, $(4+2+2+2+1+1)$, $(4+2+2+1+1+1+1)$, $(4+2+1+1+1+1+1+1)$, $(4+1+1+1+1+1+1+1+1)$, $(3+3+3+3)$, $(3+3+3+2+1)$, $(3+3+3+1+1+1)$, $(3+3+2+2+2)$, $(3+3+1+1+1+1+1+1)$, $(3+2+2+2+2+1)$, $(3+1+1+1+1+1+1+1+1+1)$, $(2+2+2+2+2+2)$, $(2+2+2+2+2+1+1)$, $(2+2+2+2+1+1+1+1)$, $(2+2+2+1+1+1+1+1+1)$, $(2+2+1+1+1+1+1+1+1+1)$, $(2+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1)$, $(1+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1)$.

Bleibt man aber bei der Annahme einer Kombination von zwei Sechspunktnern, so sind nach Tabelle II grundsätzlich 16 verschiedene Konfigurationen möglich, von denen wiederum 3 durch verschiedene Punktsymmetriegruppen erzeugt werden können. Geeignete Wahl der Punktlagen führt überdies zu den folgenden Übergängen: a) kann aus c), d), h), k); b) aus c), e), g); c) aus f); d) aus f), l); e) aus f); g) aus i); h) aus i), m); k) aus l), m); n) aus m), p); o) aus m), p), und q) aus h) hervorgehen. Die tatsächlich im Benzolmolekül vorliegende Konfiguration kann also unter Voraussetzung der Gleichwertigkeit für beide Atomarten insgesamt von 11 Symmetriefällen erzeugt werden. Symmetriebedingt ist sie als $2C_{2v}$ *in* D_{6h}, $2C_2$ in D_6, $2C_2$ in D_{3d}; nicht notwendig folgt sie als $2C_s$ in C_{6h}, $2C_s$ in C_{6v}, $2C_1$ in C_6, $2C_s^{\perp}$ in $D_3{}^h$, $2C_1$ in C_{3v}, $2C_s$ in D_{3d}, $2C_1$ in C_{3i}, $2C_1$ in D_3. Der kursiv gedruckte Fall ist der höchstsymmetrische: wenn keine Gegengründe vorliegen, hat er die grösste Wahrscheinlichkeit für sich.

Die Entscheidung zwischen möglichen Konfigurationen wird oft durch die Heranziehung anderer Untersuchungsmethoden erleichtert. Zur Einschränkung der Vieldeutigkeit bezüglich der Punktgruppen, die

eine Konfiguration erzeugen können, liefert aber die Beobachtbarkeit der Schwingungen in den Spektren selbst ein vorzügliches Mittel. So gibt es im Falle des 12atomigen Benzolmoleküls insgesamt $3 \cdot 12 - 6 = 30$ Freiheitsgrade der Schwingung, die sich für die tatsächliche Konfiguration auf 10 A- oder B- und 10 E-Typen verteilen. Damit wird wiederum $10 \cdot 1 + 10 \cdot 2 = 30$. Die feinere Aufspaltung der Klassen in den 11 möglichen Punktgruppen ist die folgende:

1. $2C_{2v}$ in D_{6h}: $2A_{1g} + A_{1u} + A_{2u} + 2B_{1u} + 2B_{2g} + 2B_{2u} + E_{1g} + 3E_{1u} + 4E_{2g} + 2E_{2u}$
2. $2C_2$ in D_6 : $2A_1 + 2A_2 + 2B_1 + 4B_2 + 4E_1 + 6E_2$
3. $2C_2$ in D_{3d}: $2A_{1g} + 2A_{1u} + 3A_{2g} + 3A_{2u} + 5E_{1g} + 5E_{1u}$
4. $2C_s$ in C_{6h}: $3A_g + A_u + 2B_g + 4B_u + \underline{E}_{1g} + 3\underline{E}_{1u} + 4\underline{E}_{2g} + 2\underline{E}_{2u}$
5. $2C_s$ in C_{6v}: $3A_1 + A_2 + 4B_1 + 2B_2 + 4E_1 + 6E_2$
6. $2C_1$ in C_6 : $4A + 6B + 4\underline{E}_1 + 6\underline{E}_2$
7. $2C_s^{\perp}$ in D_{3h}: $4A_1' + 2A_1'' + 3A_2' + A_2'' + 7E_1' + 3E_1''$
8. $2C_1$ in C_{3v}: $5A_1 + 5A_2 + 10E_1$
9. $2C_s$ in D_{3d}: $4A_{1g} + 2A_{1u} + A_{2g} + 3A_{2u} + 5E_{1g} + 5E_{1u}$
10. $2C_1$ in D_3 : $6A_1 + 4A_2 + 10E_1$
11. $2C_1$ in C_{3i} : $5A_g + 5A_u + 5\underline{E}_{1g} + 5\underline{E}_{1u}$

Die Beobachtbarkeit der insgesamt 20 Normalfrequenzen unterscheidet sich in den 11 Fällen folgenderweise:

Fall	Raman		Infrarot		Nach beiden Methoden beobachtbare Schwingungen	Im ganzen beobachtbare Schwingungen (von 20)
	p	dp	$\mathfrak{M}_{\parallel}$	$\mathfrak{M}_{\perp}$		
1	2	5	1	3	—	11
3	2	5	3	5	—	15
2	2	10	2	4	4	14
4	3	5	1	3	—	12
5	3	10	3	4	3+4	13
9	4	5	3	5	—	17
7	4	10	1	7	7	15
6	4	10	4	4	4+4	14
11	5	5	5	5	—	20
8	5	10	5	10	5+10	15
10	6	10	4	10	10	20

Man sieht, dass sich in diesem Beispiel alle 11 Fälle auseinanderhalten lassen. Das ist nun freilich nicht immer so, wie etwa die Rechnung für die kubischen 4-, 6-, 8- und 12-Punktner zeigt. Für die tetraedrische

Anordnung sind nämlich die beiden Fälle T_d und T ununterscheidbar, für die hexaedrische Anordnung können die Fälle O_h, O, T_h, T_d und T alle voneinander unterschieden werden, für die oktaedrische Anordnung unterscheidet sich nur der Fall O von den beiden Fällen O_h und T_h, und für die rhombendodekaedrische Anordnung schliesslich werden wieder alle Fälle O_h, O, T_h, T_d und T unterscheidbar.

Auf diese Weise kann man nicht nur für jede beliebige Konfiguration die Unterscheidbarkeit der möglichen Punktgruppen untersuchen, sondern es lassen sich auch für verschiedene in Betracht fallende Konfigurationen die Eigenschaften der beobachtbaren Normalschwingungen vergleichen. Damit ist aber grundsätzlich die Möglichkeit gegeben, die symmetriebedingte Vieldeutigkeit wenigstens im Einzelfall zu umschreiben.

Literatur

1. S. Bhagavantam, Scattering of Light and the Raman Effect, Waltair 1940.
2. S. Bhagavantam und T. Venkatarayudu, Theory of Groups and its Application to Physical Problems, Waltair 1948.
3. S. Bhagavantam und D. Suryanarayana, Acta cryst. **2** (1949) 21.
4. C. J. Brester, Diss. Utrecht 1923.
5. G. Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure, II. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules, New York 1945.
6. H. A. Jahn und E. Teller, Proc. Royal Soc. A **161** (1937) 220.
7. K. W. F. Kohlrausch, Der Smekal-Raman-Effekt, Ergänzungsband, Berlin 1938.
8. P. Niggli, Helv. chim. Acta **32** (1948/49) 770, 913, 1453.
9. W. Nowacki, Z. Krist. A **86** (1933) 19.
10. G. Placzek in Marx, Hdb. d. Radiologie VI/2, 2. Aufl., Leipzig 1934.
11. J. E. Rosenthal und G. M. Murphy, Rev. mod. Phys. **8** (1936) 317.
12. L. Tisza, Z. Phys. **82** (1933) 48.
13. E. Wigner, Nachr. Ges. d. Wiss., Göttingen 1930.
14. E. B. Wilson jr., J. chem. phys. **2** (1934) 432.
15. T. Y. Wu, Vibrational Spectra and Structure of Polyatomic Molecules, 2. Aufl., Ann Arbor, Mich. 1946.