

ИНСТИТУТ
ФИЗИКИ



им. Л.В.Киренского

Мисюль С.В., Батуринец Е.Е.,
Александров К.С.

АТОМНЫЕ СМЕЩЕНИЯ В
КРИСТАЛЛАХ С
ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППОЙ
 O_h^5 -Fm3m, ВОЗНИКАЮЩИЕ ПРИ
ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ.
1. АНАЛИЗ ПЕРЕСТАНОВОЧНОГО
ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Препринт 841 Ф
Красноярск, 2007

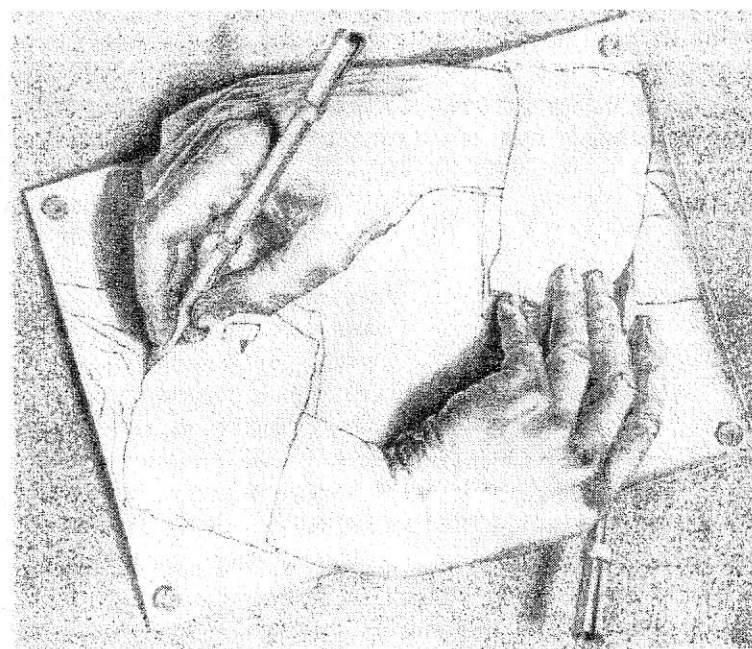
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ им. Л.В.КИРЕНСКОГО

Препринт № 841 Ф

**АТОМНЫЕ СМЕЩЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ
ГРУППОЙ O_h^3 -Fm $\bar{3}m$, ВОЗНИКАЮЩИЕ ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ.**

1. АНАЛИЗ ПЕРЕСТАНОВОЧНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

С.В.Мисюль, Е.Е.Батуринец, К.С.Александров



Красноярск 2007

УДК 548.1

Построены базисные функции неприводимых представлений пространственной группы O_h^5 для всех Лифшицевских точек зоны Бриллюэна кубической гранецентрированной решетки, входящих в перестановочное представление, реализованного на всех позициях правильных систем точек группы O_h^5 . Такие функции позволяют анализировать изменение структуры любого кристалла, высокосимметричная фаза которого есть O_h^5 , при фазовых переходах типа порядок-беспорядок. Все результаты приведены в табличной форме, удобной для пользования.

Оглавление

	стр.
1. Введение	3
2. Теоретико-групповые методы исследования фазовых переходов	4
3. Описание таблиц	9
4. Таблицы	12
5. Литература	41

I. ВВЕДЕНИЕ

В пространственной группе O_h^5 -Fm3m кристаллизуется большое число соединений, часть из которых имеет важные в практическом отношении свойства. Особый интерес вызывают многочисленные перовскитоподобные соединения, пространственная группа кубической фазы которых есть O_h^5 , испытывающие при изменении внешних воздействий многочисленные фазовые переходы (ФП) [1,2]. К таким соединениям относятся, например, интенсивно изучаемые в настоящее время кристаллы эльпасолиты с общей формулой $A_2BV'X_6$ (A, B, B' – катионы, X – анион). Такие соединения встречаются среди галогенидов, оксидов, оксигалогенидов, цианидов, гидридов. Катионами A и B могут быть так же аммонийные группы NH_4 .

В отличие от простых перовскитов ABX_3 , где все октаэдры эквивалентны, в эльпасолитах, называемых также упорядоченными перовскитами, имеется два сорта ионных групп BX_6 и $B'X_6$, которые чередуются вдоль трех осей четвертого порядка. Таким образом, эльпасолитная кубическая ячейка может рассматриваться как перовскитная с удвоенным параметром элементарной ячейки. Частным случаем эльпасолитной структуры является криолит $A_3B'X_6$, в котором атомы A и B из эльпасолита $A_2BV'X_6$ химически эквивалентны.

Большинство ФП, наблюдаемых в данных соединениях, описываются как ротационные искажения, связанные с малыми поворотами октаэдрических групп BX_6 и $B'X_6$ [1,2]. Многочисленные исследования (см. [1,2]) показывают, что модель жестких связанных октаэдрических ионов хорошо подходит для эльпасолитных соединений с атомарными катионами. Сравнительно недавние исследования аммонийных эльпасолитов $(NH_4)_2KGaF_6$ [3] и $(NH_4)_2KWO_3F_3$ [4], твердых растворов аммонийных криолитов $(NH_4)_3Ga_{1-x}Sc_xF_6$ [5,6], оксифторидов $(NH_4)_3WO_3F_3$, $(NH_4)_3TiOF_5$ [7] показали, что при СФП помимо поворотов октаэдрических групп вероятно происходит упорядочение других структурных элементов – атомов и целых групп.

При изучении ФП в эльпасолитных соединениях хорошо зарекомендовала себя схема, на первом этапе которой проводится теоретико-групповой анализ возможных искажений структуры кристаллов [8]. Такой анализ позволяет перечислить возможные группы искаженных фаз, правильно выбрать модель структуры низкосимметричной фазы, описать поведение физических свойств.

Симметричному анализу кристаллов с пространственной группой O_h^5 -Fm3m посвящено немало работ [9, 10, 11, 12]. Так в ранней работе по теоретико-групповому анализу ФП в кристаллах с пространственной

группой O_h^s [9] получены группы искаженных фаз, индуцированных всеми неприводимыми представлениями (НП) Лифшицевских точек зоны Бриллюэна. Позже аналогичная работа была проведена для всех 230 пространственных групп, в том числе и для O_h^s [10]. Для анализа экспериментальных работ по ФП в галоидных зльпасолитах и криолитах было исследовано механическое представление в предположении жестких связанных и не искажающихся при ФП октаэдрических ионов VX_6 и $V'X_6$ [11]. Упомянем работу [12], в которой рассматривались перестановочное и механические представления для плотноупакованных структур с такой же пространственной группой. Напомним, что базисными функциями механического представления являются смещения атомов структуры, а перестановочного – скалярные величины, которые в случае ФП типа порядок-беспорядок могут быть связаны с относительными вероятностями атомов занять определенное положение в кристалле.

К сожалению, во всех перечисленных работах представления анализировались для правильных систем точек (ПСТ) в кристаллической ячейке группы O_h^s с малой кратностью. Однако последние экспериментальные работы, упомянутые выше [3-7], требуют рассмотрения механического и перестановочного представлений для правильных систем точек в группе O_h^s с гораздо большей кратностью. Целью настоящей работы является анализ и построение базисных функций перестановочного представления для всех правильных систем точек группы O_h^s .

2. ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Основы теоретико-группового анализа были заложены в феноменологической теории переходов второго рода Ландау [13]. В теории Ландау структура кристалла описывается некоторой функцией плотности $\rho(r)$, а переход $G_0 \rightarrow G_d$ характеризуется её изменением $\delta\rho(r)$. Здесь G_0 и G_d – пространственные группы симметрии исходной и низкосимметричной (искаженной) фаз, причём G_d является подгруппой группы G_0 . Функцию $\delta\rho(r)$ можно разложить по базисным функциям полных неприводимых представлений (НП) группы G_0 :

$$\delta\rho(r) = \sum \sum_{i=1}^{n_j} C_i^j \phi_i^j(r), \quad (1)$$

где индекс j нумерует НП τ_j размерности n_j , а индекс i – базисные функции $\phi_i^j(r)$ этого представления. Коэффициенты C_i^j являются компонентами многомерных параметров порядка.

В теории Ландау на основе симметричных и термодинамических соображений обосновывается утверждение о том, что потеря устойчивости кристаллической решётки в точке фазового перехода обусловлена лишь одним из этих параметров порядка, который далее будем называть критическим. Иными словами, непрерывные ФП (переходы второго рода) могут индуцироваться только неприводимыми представлениями τ_j группы G_0 . Однако, иногда наблюдаются такие переходы, которые индуцируются несколькими критическими параметрами порядка. В этом случае критическое представление является приводимым [14]. Представление, по которому преобразуется критический (первичный) параметр порядка, будем также называть критическим.

Лифшицем [15] было показано, что переходы в структуры, соразмерные с исходной, могут индуцироваться только теми НП τ_j , которые удовлетворяют определённым критериям (антисимметричный квадрат τ_j и векторное представление группы G_0 не должны иметь общих НП). Отсюда следует, что переходы в соразмерные фазы индуцируются лишь теми НП группы G_0 , которые соответствуют точкам выделенной симметрии в зоне Бриллюэна. Поскольку каждая группа G_0 имеет относительно небольшое число таких НП, в целом ряде работ рассматривалась задача о нахождении всех возможных понижений пространственной симметрии, не приводящие к несоразмерным структурам. Для перечисления соответствующих таким структурам групп симметрии G_d необходимо найти стационарные (инвариантные) векторы $\vec{C} = (C_1^j, C_2^j, \dots, C_{n_j}^j)$, компонентами которых являются, коэффициенты из формулы (1). Эти векторы определяют явный вид параметров порядка, ответственных за фазовые переходы. Они сохраняются всеми матрицами ограничения НП τ_j на группе G_d , что и отражено в их названии. Компоненты стационарного вектора зависят от некоторого числа произвольных постоянных, далее обозначаемые начальными буквами латинского алфавита. Для решения задачи перечисления возможных G_d созданы математические программы [10, 14].

В то же время полный теоретико-групповой анализ фазовых переходов в кристаллах не ограничивается указанием возможных групп симметрии G_d низкосимметричных фаз и соответствующих им критических параметров порядка (стационарных векторов). Это лишь первый этап такого анализа.

Ограничившись в формуле (1) вкладом от критического НП, мы выделяем основной по порядку величины вклад в изменение структуры

кристалла вблизи точки фазового перехода. Однако в силу взаимодействия между различными степенями свободы в измененную структуру кристалла вносят вклад также и некоторые другие члены из формулы (1). Они соответствуют некритическим (вторичным в терминологии [14]) параметрам порядка. Такие вклады на примере фазовых переходов без изменения объема примитивной ячейки рассмотрены в [16]. В [17] обсуждался вопрос об определении относительной величины вторичных и первичных параметров порядка, но полученные в этой работе результаты не являются справедливыми для всех случаев. Общий теоретико-групповой метод определения всех возможных некритических параметров порядка, сопутствующих данному критическому параметру порядка, и позволяющий оценить их относительный порядок величины вблизи точки фазового перехода, предложен в [14]. При этом было введено важное понятие полного конденсата параметров порядка.

Это понятие наиболее просто интерпретируется в рамках представления о мягкой моде. Действительно, при переходе типа смещения конденсация нормального колебания, принадлежащего мягкой моде, определяет критические смещения атомов в искаженной фазе. В силу взаимодействия между нормальными колебаниями при этом должны попасть в конденсат также и все другие (некритические) атомные смещения, не нарушающие симметрии кристалла, заданную критическими смещениями. Полный конденсат критических и некритических смещений определяет структуру низкосимметричной фазы.

Вблизи точки фазового перехода, как правило, некритические смещения малы по сравнению с критическими, но по мере удаления от неё по температуре обе величины этих смещений могут сравняться между собой по порядку величины. И те и другие должны учитываться при расшифровке кристаллической структуры. Более того, в тех случаях, когда критическими являются смещения лёгких атомов, трудно определяемые рентгеновскими методами, о них можно судить по набору некритических смещений атомов, обладающих большей рассеивающей способностью. В ряде случаев даже малые некритические смещения могут играть существенную роль, например, именно они приводят к возникновению спонтанной поляризации при несобственных сегнетоэлектрических переходах. Таким образом, понятие полного конденсата является симметричной основой исследования несобственных фазовых переходов любой природы.

Из-за трудоемкости процедуры определения полного конденсата параметров порядка работ в этом направлении не так много. В основном они выполнены группой авторов из Южного федерального университета и Института физики им.Л.В.Киренского СО РАН. Такая работа проделана для кристаллов следующих групп: O_h^1 [18], O_h^7 [19], D_{3h}^1 [20], D_{3h}^{17} [21]. Сравнительно недавно был найден полный конденсат параметров порядка для всех непрерывных фазовых переходов в кристаллах с пространственными группой O_h^2 -Fm3m [22].

Далее для анализа структуры диссимметричных фаз с помощью полного конденсата параметров порядка требуется знание базисных функций НП пространственной группы (см.формулу (1)). Базисные функции НП не определяются однозначно самим представлением, а зависят также от структуры кристалла и от типа ФП.

В результате ФП из исходной фазы кристалла возникает состояние, которое на микроскопическом уровне может быть охарактеризовано появлением на каждом атоме некоторого спонтанного свойства, описываемого скаляром, вектором или тензором. Так в случае ФП типа смещения атому в диссимметричной фазе можно приписать полярный вектор – смещение атома по отношению к его положению в исходной фазе, т.е. базисные функции являются линейными комбинациями векторов, характеризующих смещения атомов. Для ФП типа упорядочения базисные функции выражаются через вероятности заполнения узлов решетки атомами. Построение таких базисных функций опирается на стандартные методы анализа механического и перестановочного представлений кристалла [23]. В [24] описан соответствующий вычислительный алгоритм, реализованный на ЭВМ, и табулированы векторные и скалярные базисы НП группы O_h^7 -Fd3m. Для нахождения базисных функций обычно пользуются методом проекционных операторов, подробное описание которого можно найти в [23, 24]. Следуя работе [23] приведем краткое изложение метода проекционных операторов.

В начале приведем основные формулы для анализа механического представления. Пусть число атомов в примитивной ячейке кристалла σ . Тогда вектор V_λ^{kv} , описывающий совокупность атомных смещений в колебательной моде λ , соответствующей НП с индексами k, v , можно представить в виде прямой суммы σ штук трехмерных векторов $e_{(k,v)}^{(i)}$, каждый из которых описывает смещения i -го атома, участвующего в колебательной моде с индексами k, v, λ . Метод проекционных операторов дает сразу выражения для векторов $e_{(k,v)}^{(i)}$:

$$e^{(kv|i)} = \sum r_{\lambda|\mu}^{*kv} \exp[ika_p(g, j)] \delta_{i, g|j} R_{\beta}^h,$$

где $r_{\lambda|\mu}^{*kv}(g)$ - матричный элемент матрицы НП kv, соответствующей элементу $g \in G_k$ группы волнового вектора k; $-a_p(g, j)$ - вектор возвращающей трансляции, символически определяемый формулой $g(0, i) = (a_p, j)$, то есть вектор, который переводит атом j в атом i того же сорта нулевой ячейки; $g|j$ - формальная запись того номера атома, в который переходит атом номера j под действием элемента $g \in G_k$; $\delta_{i, g|j}$ - символ Кронекера, равный единице при $i = g|j$ и нулю в противном случае; элементы симметрии h, взяты из [25], действуют на векторы в трехмерном пространстве и представлены в виде трехмерных матриц R^h . Запись R_{β}^h означает, что в формуле взят β столбец матрицы R^h . Суммирование в формуле проходит только по тем элементам $g = (h|\alpha)$, у которых h принадлежит кристаллическому классу G_k^g группы волнового вектора G_k . Индексы μ, j, β в формуле, заключенные в квадратные скобки должны фиксироваться. Эти индексы определяют старт при построении базисных функций. Изменение старта приводит либо к новой системе базисных функций, либо к нулю. Если НП входит в состав механического представления несколько раз, то каждому такому вхождению соответствует свой базис.

Формула определяет базисные функции для НП группы G_k волнового вектора. НП всей пространственной группы реализуются на базисе, который включает базисные функции для всех лучей k_L звезды исходного волнового вектора k. Если известны базисные функции НП группы G_k волнового вектора k, то для произвольного луча k_L базисные функции будут выражаться посредством соотношения:

$$e^{(kv|i)} = \exp[ik_L a_p(g_L, i)] \sum R_{\beta}^h e^{(kv|i)}$$

Вектор k_L определяется из соотношения $k_L = g_L k$. При этом g_L не принадлежит группе G_k волнового вектора k. Вектор k_L не эквивалентен другим лучам рассматриваемой звезды. Действие же элемента $g_L = (h_L|\alpha_L)$ на вектор k определяется лишь соответствующим этому элементу точечным преобразованием симметрии h_L , т.е. $k_L = g_L k = h_L k$.

Построение базисных функций для перестановочного представления аналогично построению для механического представления. Приведем основные формулы этого процесса:

$$e^{(kv|i)} = \sum r_{\lambda|\mu}^{*kv} \exp[ika_p(g, j)] \delta_{i, g|j},$$

$$e^{(k_L v|i)} = \exp[ik_L a_p(g_L, i)] e^{(kv|i)}.$$

Для кубических пространственных групп работа по определению базисных функций как перестановочного так и механического представлений является трудоемкой. Для решения подобных задач сотрудниками физического факультета Южного федерального университета под руководством профессора В.П.Сахненко и доцента Г.М.Чечина создан комплекс математических программ [25]. В настоящей работе с помощью этого комплекса выполнен анализ перестановочного и механического представлений для всех Лифшицевских точек зоны Бриллюэна и для всех правильных систем точек (ПСТ) пространственной группы O_h^3 . Из-за большого объема публикация всех результатов разбита на две части. Первая часть посвящена только перестановочному представлению. Все результаты собраны в форме таблиц.

3. ОПИСАНИЕ ТАБЛИЦ

В таблице 1 приведен список лифшицевских точек зоны Бриллюэна пространственной группы O_h^3 -Fm3m. Обозначения волновых векторов - согласно справочников Ковалева [26] и Миллера [27]. В таблице 1 так же приведены все лучи звезд и элементы симметрии группы O_h^3 , при помощи которых получаются соответствующие неэквивалентные волновые вектора или лучи. Точечные элементы, необходимые в этой таблице и далее, имеют следующий геометрический смысл:

- h_2 - поворот на 180° вокруг оси $[1, 0, 0]$;
- h_3 - поворот на 180° вокруг оси $[0, 1, 0]$;
- h_4 - поворот на 180° вокруг оси $[0, 0, 1]$;
- h_5 - поворот на 240° вокруг оси $[1, 1, 1]$;
- h_6 - поворот на 240° вокруг оси $[\bar{1}, \bar{1}, \bar{1}]$;
- h_9 - поворот на 120° вокруг оси $[1, 1, 1]$;
- h_{11} - поворот на 120° вокруг оси $[\bar{1}, \bar{1}, 1]$;
- h_{13} - поворот на 180° вокруг оси $[\bar{1}, 1, 0]$;
- h_{25} - инверсия.

В таблице 2 приведены координаты всех точек правильных систем, для которых построены скалярный и векторный базисы. Обозначения этих систем и координаты точек заимствованы из справочника [28]. В таблице 2 отсутствуют координаты точек позиции 192i, так как из-за громоздкости для этой позиции результаты расчетов в настоящей работе не приводятся. Все координаты приведены относительно декартовой системы координат, реперами которой являются вектора

гранецентрированной решетки Браве: $\mathbf{a}_1 = -\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3 = 2\tau(1, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3 = 2\tau(0, 1, 0)$, $\mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3 = 2\tau(0, 0, 1)$. Основные периоды кубической гранецентрированной решетки Гр: $\mathbf{a}_1 = \tau(0, 1, 1)$, $\mathbf{a}_2 = \tau(1, 0, 1)$, $\mathbf{a}_3 = \tau(1, 1, 0)$. Параметр кубической ячейки Браве вдоль любой оси декартовой системы координат равен $a = 2\tau$. Для каждой правильной системы точек в таблице 2 приведены координаты только основных точек систем. Координаты всего набора точек данной системы получаются путем последовательного сложения координат, приведенных в таблице 2, со следующими: $(0, 0, 0)$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$.

В таблице 3 приведены матрицы НП для всех Лифшицевских точек зоны Бриллюэна. Каждое представление задано своими матрицами генераторами. Обозначения НП даны в двух видах. Один вид соответствует справочнику [26] и состоит из записанных через черточку номера звезды волнового вектора и порядкового номера НП из [26]. Второй соответствует принятому в иностранной литературе обозначению из [27].

В таблице 4 указана кратность вхождения НП группы O_h^3 в состав механического и перестановочного представлений правильных систем точек группы. Строки этой таблицы нумеруются НП, а столбцы - правильными системами точек в обозначениях [28]. На пересечении строк и столбцов таблицы 4 стоят два числа, разделенных дефисом. Первое из них дает кратность вхождения данного НП в механическое представление, а второе - в перестановочное представление на точках рассматриваемой ПСТ. Например, из таблицы 4 можно увидеть, что НП 11-9 входит в механическое представление, построенное на орбитах 24e и 32f по одному разу, на орбитах 48g и 48h - по два раза и четыре раза в механическое представление на орбитах 96j и 96k. В то время как в перестановочное представление это НП 11-9 входит по одному разу только на орбитах 96j и 96k.

Во всех остальных таблицах (таблицы с 5 по 12) приведены атомные компоненты скалярных базисных функций НП группы O_h^3 (такие базисы имеют только те НП, которые входят в перестановочное представление). Скалярная базисная функция сопоставляет точкам орбиты пространственной группы некоторые скалярные величины ("цвета"). Нумерация столбцов соответствуют номерам координат точек из правильных систем, приведенных в таблице 2.

Атомные компоненты скалярных базисных функций зависят от некоторого числа произвольных постоянных (они обозначены буквами конца латинского алфавита p, q, r, s, t, u), причём это число равно

кратности вхождения данного НП в перестановочное представление на рассматриваемой орбите. Большая буква, соответствующая одноимённой малой букве, означает, что последняя умножается на мнимую единицу i , например, $P = ip$, $Q = iq$ и т.д.

Во многих работах [11, 12, 14, 23] базисные функции НП приводятся в отличной от принятой в таблицах 5-12 форме: если кратность вхождения данного НП в перестановочное (механическое) представление равна n , то указывается n разных вариантов базиса. Эти варианты естественным образом получаются с помощью метода проекционных операторов. Произвольная их линейная комбинация, которая, очевидно, зависит от n произвольных параметров, является базисом наиболее общего вида. Именно эти базисы общего вида и приведены в таблицах 5-12. Такая форма задания базисов НП, с одной стороны, позволяет сделать таблицы более компактными, а с другой, как только что было отмечено, имеет вполне определённый математический смысл. Поясним сказанное примерами.

Для НП 8-1 и правильной системы точек 24e из таблицы 5 находим шесть базисных функций (представление 8-1 шестимерное): $\varphi_1 = (p, -p, q, q, -q, -q)$, $\varphi_2 = (p, -p, -q, -q, q, q)$, $\varphi_3 = (-q, -q, p, -p, q, q)$, $\varphi_4 = (q, q, p, -p, -q, -q)$, $\varphi_5 = (q, q, -q, -q, p, -p)$, $\varphi_6 = (-q, -q, q, q, p, -p)$. Так как НП 8-1 дважды входит в перестановочное для данной позиции, поэтому базисные функции зависят от от двух произвольных постоянных p и q . По этой причине имеется два варианта базиса φ_i и φ_i' . Первый из них получим, полагая $p = 1, q = 0$, второй - полагая $p = 0, q = 1$:

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= (1, -1, 0, 0, 0, 0), & \varphi_2 &= (1, -1, 0, 0, 0, 0), & \varphi_3 &= (0, 0, 1, -1, 0, 0), \\ \varphi_4 &= (0, 0, 1, -1, 0, 0), & \varphi_5 &= (0, 0, 0, 0, 1, -1), & \varphi_6 &= (0, 0, 0, 0, 1, -1) \text{ и} \\ \varphi_1' &= (0, 0, 1, 1, -1, -1), & \varphi_2' &= (0, 0, -1, -1, 1, 1), & \varphi_3' &= (-1, -1, 0, 0, 1, 1), \\ \varphi_4' &= (1, 1, 0, 0, -1, -1), & \varphi_5' &= (1, 1, -1, -1, 0, 0), & \varphi_6' &= (-1, -1, 1, 1, 0, 0). \end{aligned}$$

Стоящие же в таблице 5 функции φ_i являются линейной комбинацией φ_i и φ_i' : $\varphi_i = p \varphi_i + q \varphi_i'$.

9-5, L ₃ ⁺ 9-6, L ₃ ⁻	$\begin{pmatrix} -I \\ I \\ -I \\ I \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -Q \\ -Q \\ -Q \\ -Q \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -Q \\ Q \\ -Q \\ Q \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} E \\ E \\ E \\ E \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} (0 & I) \\ (I & 0) \\ (0 & I) \\ (I & 0) \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} D_r \\ D_r \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & C \\ C & 0 \end{pmatrix}$	$\pm \begin{pmatrix} I \\ I \\ I \\ I \end{pmatrix}$
10-1, X ₁ ⁺ 10-2, X ₁ ⁻	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	A	B	$\pm \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
10-3, X ₃ ⁺ 10-4, X ₃ ⁻	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$	A	-B	$\pm \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
10-5, X ₂ ⁺ 10-6, X ₂ ⁻	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	A	-B	$\pm \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
10-7, X ₄ ⁺ 10-8, X ₄ ⁻	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$	A	B	$\pm \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
10-9, X ₅ ⁺ 10-10, X ₅ ⁻	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
11-1, Γ ₁ ⁺ 11-2, Γ ₁ ⁻	1	1	1	1	1	1	1	±1
11-3, Γ ₂ ⁺ 11-4, Γ ₂ ⁻	1	1	1	1	1	1	-1	±1
11-5, Γ ₃ ⁺ 11-6, Γ ₃ ⁻	I	I	I	I	I	W	Q	±I
11-7, Γ ₅ ⁺ 11-8, Γ ₅ ⁻	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$	A	B	$\pm \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
11-9, Γ ₄ ⁺ 11-10, Γ ₄ ⁻	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$	A	-B	$\pm \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

Примечания. Номер НП задается двумя числами, разделенными дефисом: первое число является номером звезды волнового вектора k_i , второе определяет порядковый номер НП данного вектора. Кроме обозначений НП, соответствующих [26], приведены так же обозначения, принятые в иностранной литературе из [27]. Матрицы НП указаны только для генераторов группы в обозначениях справочника [26]. Диагональные матрицы приведены в форме столбца, соответствующего элементу на их главной диагонали. Знак «±» определяет два НП, в первое НП матрица входит со знаком «+», во второе – со знаком «-». Символ * означает комплексное сопряжение. Буквами отмечены матрицы вида:

$$\gamma = \exp(2\pi i/3), \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad D_r = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma \\ 0 & \gamma & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_r = \begin{pmatrix} 0 & 0 & I \\ I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \end{pmatrix}$$

$$B_1 = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I \\ 0 & I & 0 \end{pmatrix}, \quad B_2 = \begin{pmatrix} Q & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Q \\ 0 & Q & 0 \end{pmatrix}$$

Таблица 4. Кратность вхождения НП группы O_h^s в состав механического и перестановочного представлений правильных систем точек.

НП	4a	4b	8c	24d	24e	32f	48g	48h	48i	96j	96k
8-1	0-1	1-0	1-0	3-1	3-2	3-1	5-1	5-3	6-2	11-5	9-3
8-2	0-0	0-0	1-0	2-0	1-0	3-1	5-1	4-0	3-1	7-1	9-3
8-3	1-0	0-1	1-0	3-1	3-2	3-1	5-1	6-2	5-3	11-5	9-3
8-4	0-0	0-0	1-0	2-0	1-0	3-1	5-1	3-1	4-0	7-1	9-3
8-5	1-0	1-0	1-1	4-2	5-1	6-2	8-4	9-3	9-3	18-6	18-6
9-1	0-1	1-0	1-1	2-1	2-1	3-2	4-2	3-2	4-1	6-2	7-3
9-2	0-0	0-0	0-0	1-0	1-0	1-0	2-0	2-1	3-0	6-2	5-1
9-3	0-0	0-0	0-0	1-0	1-0	1-0	2-0	3-0	2-1	6-2	5-1
9-4	1-0	0-1	1-1	2-1	2-1	3-2	4-2	4-1	3-2	6-2	7-3
9-5	0-0	1-0	1-0	3-1	3-1	4-1	6-2	6-2	6-2	12-4	12-4
9-6	1-0	0-0	1-0	3-1	3-1	4-1	6-2	6-2	6-2	12-4	12-4
10-1	0-1	0-1	1-0	2-1	2-2	2-1	3-1	3-2	3-2	6-3	5-2
10-2	0-0	0-0	0-0	0-0	0-0	1-0	2-0	1-0	1-0	3-0	4-1
10-3	0-0	0-0	0-0	1-0	1-0	1-0	1-1	2-0	2-0	4-1	4-1
10-4	1-0	1-0	0-1	1-1	2-1	2-1	2-2	3-1	3-1	5-2	5-2
10-5	0-0	0-0	0-0	2-0	1-1	1-0	2-0	3-1	3-1	6-3	4-1
10-6	0-0	0-0	1-0	1-0	0-0	2-1	3-1	2-0	2-0	3-0	5-2
10-7	0-0	0-0	0-1	1-1	1-0	2-1	2-2	2-1	2-1	4-1	5-2
10-8	0-0	0-0	0-0	0-1	1-0	1-0	1-1	2-1	2-1	5-2	4-1
10-9	0-0	0-0	1-0	3-0	2-0	3-1	5-1	4-1	4-1	8-2	9-3
10-10	1-0	1-0	1-0	2-1	3-1	3-1	5-1	5-2	5-2	10-4	9-3
11-1	0-1	0-1	0-1	0-1	1-1	1-1	1-1	1-1	1-1	2-1	2-1
11-2	0-0	0-0	0-0	0-0	0-0	0-0	0-0	0-0	0-0	1-0	1-0
11-3	0-0	0-0	0-0	0-0	0-0	0-0	0-0	1-0	1-0	2-1	1-0
11-4	0-0	0-0	0-1	1-0	0-0	1-1	1-1	1-0	1-0	1-0	2-1
11-5	0-0	0-0	0-0	0-1	1-1	1-0	1-1	2-1	2-1	4-2	3-1
11-6	0-0	0-0	0-0	1-0	0-0	1-0	1-1	1-0	1-0	2-0	3-1
11-7	0-0	0-0	1-0	0-1	1-0	2-1	3-1	2-1	2-1	4-1	5-2
11-8	0-0	0-0	0-0	2-0	1-0	1-0	2-0	2-1	2-1	5-2	4-1
11-9	0-0	0-0	0-0	0-0	1-0	1-0	2-0	2-0	2-0	4-1	4-1
11-10	1-0	1-0	1-0	3-0	2-1	2-1	3-1	3-1	3-1	5-2	5-2

Примечания. Числа, стоящие на пересечении строк и столбцов и разделенные дефисом, указывают на вхождение НП группы O_h^s в

механическое (первое число) и перестановочное (второе число) представления для соответствующей правильной системе точек группы O_h^5 .

Таблица 5. Скалярные базисные функции неприводимых представлений группы O_h^5 для точек позиций 4a, 4b, 8c.

НП	k_i	4a	4b	НП	k_i	8c		
		1	1			1	2	
8-1	1	p	-	8-5	1	p	-P	
	2	p	-		2	-P	p	
	3	p	-		3	p	-P	
	4	p	-		4	P	-P	
	5	p	-		5	p	-P	
	6	p	-		6	-P	p	
8-3	1	-	p	9-1	1	p	-p	
	2	-	-p		2	-p	p	
	3	-	p		3	-p	p	
	4	-	-p		4	-p	p	
	5	-	p		9-4	1	p	p
	6	-	-p			2	-p	-p
9-1	1	p	-	3	-p	-p		
	2	p	-	4	-p	-p		
	3	p	-	10-4	1	p	-p	
	4	p	-		2	p	-p	
			3		p	-p		
9-4	1	-	p	10-7	1	p	p	
	2	-	p		2	p	p	
	3	-	p		3	p	p	
	4	-	p					
10-1	1	p	p	11-1	1	p	p	
	2	p	p	11-4	1	p	-p	
	3	p	p					
11-1	1	p	p					

Примечания. В этой и последующих таблицах: k_i – номера векторов соответствующей звезды из таблицы 1; прочерк означает, что данное НП не входит в перестановочное для этой позиции; числами 1, 2, 3, ... в шапке таблицы указаны номера точек из таблицы 2; множитель k в таблицах соответствует $\sqrt{3}$; атомные компоненты скалярных базисных функций зависят от некоторого числа произвольных постоянных (они обозначены буквами конца латинского алфавита p, q, r, s, t, u), причём это число равно кратности вхождения данного НП в перестановочное

представление на рассматриваемой орбите; большая буква, соответствующая одноимённой малой букве, означает, что последняя умножается на мнимую единицу i , например, $P = ip$, $Q = iq$ и т.д.

Таблица 6. Скалярные базисные функции неприводимых представлений группы O_h^5 для точек позиций 24d и 24e.

НП	k_i	24d						24e					
		1	2	3	4	5	6	1	2	3	4	5	6
8-1	1	0	0	p	-p	P	-P	p	-p	q	q	-q	-q
	2	0	0	P	-P	p	-p	p	-p	-q	-q	q	q
	3	P	-P	0	0	p	-p	-q	-q	p	-p	q	q
	4	p	-p	0	0	P	-P	q	q	p	-p	-q	-q
	5	p	-p	P	-P	0	0	q	q	-q	-q	p	-p
	6	P	-P	p	-p	0	0	-q	-q	q	q	p	-p
8-3	1	0	0	p	-p	-P	P	p	p	q	q	q	q
	2	0	0	P	-P	-P	P	-p	p	-q	-q	-q	-q
	3	-P	P	0	0	p	-p	q	q	p	p	q	q
	4	-p	p	0	0	P	-P	-q	-q	-p	-p	-q	-q
	5	p	-p	-P	P	0	0	q	q	q	q	p	p
	6	P	-P	-p	p	0	0	-q	-q	-q	-q	-p	-p
8-5	1	p	P	q	q	0	0	0	0	0	0	p	-p
	2	p	-P	-Q	-Q	0	0	0	0	0	0	-p	p
	3	-p	-P	0	0	-q	-q	0	0	-p	p	0	0
	4	0	0	p	P	q	q	p	-p	0	0	0	0
	5	Q	q	0	0	p	P	0	0	p	-p	0	0
	6	-Q	-Q	0	0	p	-P	0	0	-p	p	0	0
9-1	1	0	p	0	p	0	p	p	-p	p	-p	p	-p
	2	-p	0	-p	0	0	-p	-p	p	-p	p	-p	-p
	3	-p	0	0	-p	-p	0	-p	p	-p	p	-p	p
	4	0	-p	-p	0	0	p	-p	p	-p	p	-p	p
9-4	1	p	0	p	0	p	0	p	p	p	p	p	p
	2	0	-p	0	-p	-p	0	p	p	p	p	p	p
	3	0	-p	-p	0	0	-p	p	p	p	p	p	p
	4	-p	0	0	-p	0	-p	p	p	p	p	p	p
9-5	1	0	2p	0	-p	0	-p	2p	-2p	p	p	-p	p
	0	0	-kp	0	0	kp	0	0	-kp	kp	kp	-kp	-kp
	2	-2p	0	p	0	0	p	-2p	2p	p	-p	-p	p
	0	0	kp	0	0	-kp	0	0	kp	-kp	kp	-kp	-kp
3	-2p	0	0	p	p	0	-2p	2p	-p	p	-p	-p	
0	0	0	0	kp	-kp	0	0	0	-kp	kp	-kp	kp	
4	0	-2p	p	0	p	0	2p	-2p	p	-p	p	-p	
0	0	kp	0	-kp	0	0	0	0	kp	-kp	-kp	kp	

9-6	1	0	0	kp	0	-kp	0	0	0	kp	kp	-kp	-kp
	2	0	0	0	-kp	kp	0	0	0	kp	kp	-kp	-kp
	3	0	-2p	0	p	p	0	2p	2p	-p	-p	-p	-p
	4	0	0	0	-kp	0	kp	0	0	kp	kp	-kp	-kp
10-1	1	p	-p	0	0	0	0	p	p	q	q	q	q
	2	0	0	p	-p	0	0	q	q	p	p	q	q
	3	0	0	0	0	p	-p	q	q	q	q	p	p
10-4	1	0	0	p	p	p	p	p	-p	0	0	0	0
	2	p	p	0	0	p	p	0	0	p	-p	0	0
	3	p	p	p	p	0	0	0	0	0	0	p	-p
10-5	1	-	-	-	-	-	-	0	0	p	p	-p	-p
	2	-	-	-	-	-	-	-p	-p	0	0	p	p
	3	-	-	-	-	-	-	p	p	-p	-p	0	0
10-7	1	p	p	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-
	2	0	0	p	p	0	0	-	-	-	-	-	-
	3	0	0	0	0	p	p	-	-	-	-	-	-
10-8	1	0	0	p	p	-p	-p	-	-	-	-	-	-
	2	-p	-p	0	0	p	p	-	-	-	-	-	-
	3	p	p	-p	-p	0	0	-	-	-	-	-	-
10-10	1	0	0	p	-p	0	0	0	0	0	0	p	-p
	2	0	0	0	0	p	p	0	0	-p	p	0	0
	3	-p	p	0	0	0	0	0	0	0	0	-p	p
11-1	1	p	p	p	p	p	p	p	p	p	p	p	p
	2	0	0	-kp	-kp	kp	kp	0	0	-kp	-kp	kp	kp
11-7	1	0	0	0	0	p	-p	-	-	-	-	-	-
	2	0	0	p	-p	0	0	-	-	-	-	-	-
11-10	1	-	-	-	-	-	-	0	0	0	0	p	-p
	2	0	0	0	0	0	0	0	0	p	-p	0	0

Таблица 7. Скалярные базисные функции неприводимых представлений группы O_h^5 для точек позиции 32f.

НП	k_i	32f							
		1	2	3	4	5	6	7	8
8-1	1	p	P	-P	-p	-p	P	-P	p
	2	p	-P	P	-p	-p	-P	P	p
	3	p	-P	-p	P	-p	-P	p	P
	4	p	P	-p	-P	-p	P	p	-P
	5	p	-p	P	-P	-p	p	P	-P
	6	p	-p	-P	P	-p	p	-P	P
8-2	1	p	P	-P	-p	p	-P	P	-p

8-3	2	p	-P	P	-p	p	P	-P	-p
	3	p	-P	-p	P	p	P	-p	-P
	4	p	P	-p	-P	p	-P	-p	P
	5	p	-p	P	-P	p	-p	-P	P
	6	p	-p	-P	P	p	-p	P	-P
	8-4	1	p	-P	P	-p	p	P	-P
2		-p	-P	P	p	-p	P	-P	p
3		p	P	-p	-P	p	-P	-p	P
4		-p	P	p	-P	p	P	-p	-P
5		p	-p	-P	P	p	-p	P	-P
6		-p	p	-P	P	-p	p	P	-P
8-5	1	p	q	q	q	q	q	q	q
	2	-Q	-P	-P	-Q	p	p	q	q
	3	p	q	q	q	q	-Q	-P	-Q
	4	Q	P	Q	P	p	-p	-q	-q
	5	p	q	p	q	q	-Q	-Q	-P
	6	-Q	-Q	-P	-P	p	p	q	q
9-1	1	p	q	q	q	-p	-q	-q	-q
	2	-q	-p	-q	-q	q	p	q	q
	3	-q	-q	-p	-q	q	q	p	q
	4	-q	-q	-q	-q	-p	q	q	p
9-4	1	p	q	q	q	p	q	q	q
	2	-q	-p	-q	-q	-q	-p	-q	-q
	3	-q	-q	-p	-q	-q	-q	-p	-q
	4	-q	-q	-q	-q	-q	-q	-q	-p
9-5	1	0	p	p	p	-2p	0	-p	-p
	2	0	-kp	kp	0	0	kp	-kp	0
	3	-p	2p	0	-p	p	-2p	0	p
	4	-kp	0	0	kp	kp	0	0	-kp
9-6	1	0	kp	-kp	0	0	kp	-kp	0
	2	0	p	p	-2p	0	p	p	-2p
	3	-kp	0	0	kp	kp	0	0	kp

	4	0	kp	-kp	0	0	kp	-kp	0
		2p	-p	-p	0	2p	-p	-p	0
10-1	1	p	-p	-p	p	p	-p	-p	p
	2	p	-p	p	-p	p	-p	p	-p
	3	p	p	-p	-p	p	p	-p	-p
10-4	1	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p
	2	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p
	3	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p
10-6	1	p	-p	-p	p	-p	p	p	-p
	2	p	-p	p	-p	-p	p	-p	p
	3	p	p	-p	-p	-p	p	p	p
10-7	1	p	p	p	p	p	p	p	p
	2	p	p	p	p	p	p	p	p
	3	p	p	p	p	p	p	p	p
10-9	1	p	-p	p	-p	p	-p	p	-p
	2	p	p	-p	-p	p	p	-p	-p
	3	p	-p	-p	p	p	-p	-p	p
10-10	1	p	-p	p	-p	p	-p	p	-p
	2	p	p	-p	-p	p	p	-p	-p
	3	p	-p	p	-p	p	-p	p	-p
11-1	1	p	p	p	p	p	p	p	p
11-4	1	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p
11-7	1	p	p	-p	-p	p	p	-p	-p
		p	-p	p	p	-p	p	-p	-p
		p	-p	-p	p	p	-p	-p	-p
11-10	1	p	p	-p	-p	-p	-p	p	p
		p	-p	p	-p	-p	p	-p	p
		p	-p	-p	p	-p	p	-p	-p

Таблица 8. Скалярные базисные функции неприводимых представлений группы O_h^2 для точек позиции 48g.

НП	k _i	48g											
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
8-1	1	0	0	p	-p	P	-P	0	0	-P	P	-p	p
	2	0	0	P	-P	p	-p	0	0	-p	p	-P	P
	3	P	-P	0	0	p	-p	-p	p	0	0	-P	P
	4	p	-p	0	0	P	-P	-P	P	0	0	-p	p
	5	p	-p	P	-P	0	0	-P	P	-p	p	0	0
	6	P	-P	p	-p	0	0	-p	p	-P	P	0	0
8-2	1	0	0	p	-p	P	-P	0	0	P	-P	p	-p
	2	0	0	P	-P	p	-p	0	0	p	-p	P	-P
	3	P	-P	0	0	p	-p	p	-p	0	0	P	-P

8-3	4	p	-p	0	0	P	-P	P	-P	0	0	p	-p
	5	pp	-pp	P	-P	0	0	P	-P	p	-p	0	0
	6	P	-P	p	-p	0	0	p	-p	P	-P	0	0
	1	0	0	pp	-pp	-P	P	0	0	-P	P	pp	-pp
	2	0	0	P	-P	p	p	0	0	-p	p	P	-P
	3	-P	P	0	0	pp	-pp	p	-p	0	0	-p	p
8-4	4	-p	p	0	0	P	-P	P	-P	0	0	-p	p
	5	p	-p	-P	P	0	0	-P	P	p	-p	0	0
	6	P	-P	-p	p	0	0	-p	p	P	-P	0	0
	1	0	0	p	-p	-P	P	0	0	P	-P	-p	p
	2	0	0	P	-P	p	p	0	0	-p	p	-P	P
	3	-P	P	0	0	pp	-pp	p	-p	0	0	P	-P
8-5	4	-p	p	0	0	P	-P	-P	P	0	0	p	-p
	5	p	-p	-P	P	0	0	-P	P	p	-p	0	0
	6	P	-P	-p	p	0	0	-p	p	-P	P	0	0
	1	p	q	r	-S	-S	s	-R	s	-R	-Q	-P	-R
	2	-Q	-P	-R	-R	-S	-S	p	q	s	r	r	s
	3	-p	q	-s	-s	-r	-r	Q	P	S	S	R	R
9-1	4	S	S	Q	P	R	R	-s	-s	-p	q	-r	-r
	5	r	r	p	q	s	s	-R	-R	-Q	-S	-S	
	6	-R	-R	-S	-S	-Q	-P	r	r	S	S	R	R
	1	p	q	p	q	p	q	-p	-q	-p	-q	-p	-q
	2	-q	-p	-q	-p	-p	-q	q	p	q	p	q	p
	3	-q	-p	-p	-q	-q	-p	q	p	q	q	q	p
9-4	4	-p	-q	-q	-p	-q	-p	q	q	p	q	q	p
	1	p	q	p	q	p	q	p	q	p	q	p	q
	2	-q	-p	-q	-p	-p	-q	-q	-p	-q	-p	-q	-p
	3	-q	-p	-p	-q	-q	-p	-q	-p	-p	-q	-q	-p
	4	-p	-q	-q	-p	-q	-p	-q	-q	-p	-q	-q	-p
	1	2p	2q	-p	-q	-p	-q	-2p	-2q	p	q	p	q
9-5	2	-2p	-2p	q	p	p	q	2q	2p	-q	-p	-p	-q
	3	-2p	-2p	p	q	q	p	2q	2p	-p	-q	-q	-p
	4	-2p	-2p	q	p	q	p	2q	2q	-q	-p	-q	-p
	1	0	0	kp	kq	kp	kq	0	0	kp	kq	-kp	-kq
	2	0	0	kq	kp	-kp	-kq	0	0	-kq	-kp	kp	kq
	3	0	0	kp	kq	-kp	-kq	0	0	-kp	-kq	kp	kq
9-6	4	0	0	kp	kq	-kp	-kq	0	0	-kp	-kq	kp	kq
	1	0	0	kp	kq	-kp	-kq	0	0	kp	kq	-kp	-kq
	2	0	0	-kq	-kp	kp	kq	0	0	-kq	-kp	kp	kq
	3	0	0	-kp	-kq	kq	kp	0	0	-kp	-kq	kq	kp
	4	0	0	-kq	-kp	kp	kq	0	0	-kq	-kp	kp	kq
	1	0	0	-kp	-kq	kq	kp	0	0	-kp	-kq	kq	kp

10-1	1	p	-p	0	0	0	0	p	-p	0	0	0	0
	2	0	0	p	-p	0	0	0	0	p	-p	0	0
	3	0	0	0	0	p	-p	0	0	0	0	p	-p
10-3	1	0	0	p	-p	0	0	0	0	p	-p	0	0
	2	-p	-p	0	0	p	-p	-p	-p	0	0	p	-p
	3	p	p	-p	-p	0	0	p	p	-p	-p	0	0
10-4	1	p	p	q	q	q	q	-p	-p	-q	-q	-q	-q
	2	q	q	p	p	q	q	-q	-q	-p	-p	-q	-q
	3	q	q	q	q	p	p	-q	-q	-q	-q	-p	-p
10-6	1	p	-p	0	0	0	0	0	0	-p	p	0	0
	2	0	0	p	-p	0	0	0	0	-p	p	0	0
	3	0	0	0	0	p	-p	0	0	0	0	-p	p
10-7	1	p	p	q	q	q	q	p	p	q	q	q	Q
	2	q	q	p	p	q	q	q	q	p	p	q	Q
	3	q	q	q	q	p	p	q	q	q	q	p	P
10-8	1	0	0	p	p	-p	-p	0	0	-p	-p	p	P
	2	-p	-p	0	0	p	p	p	p	0	0	-p	-p
	3	p	p	-p	-p	0	0	-p	-p	p	p	0	0
10-9	1	0	0	0	0	p	-p	0	0	0	0	p	-p
	2	0	0	0	0	p	-p	0	0	0	0	p	-p
	3	p	-p	0	0	0	0	p	-p	0	0	0	0
10-10	1	0	0	0	0	-p	p	0	0	-p	p	0	0
	2	0	0	0	0	p	-p	0	0	0	0	-p	p
	3	-p	p	0	0	0	0	p	-p	0	0	0	0
11-1	1	p	p	p	p	p	p	p	p	p	p	p	p
11-4	1	p	p	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p	-p	-p
11-5	1	2p	2p	-p	-p	kp	kp	-p	-p	2p	2p	-p	-p
	0	0	0	-kp	-kp	kp	kp	0	0	0	0	-kp	-kp
11-6	1	0	0	kp	kp	-kp	-kp	0	0	-kp	-kp	kp	kp
	2p	2p	-p	-p	-p	-p	-2p	-2p	p	p	p	p	p
11-7	1	0	0	0	0	p	-p	0	0	0	0	p	-p
	p	-p	0	0	0	0	0	p	-p	0	0	0	0
11-10	1	0	0	0	0	p	-p	0	0	0	0	p	-p
	0	0	p	-p	0	0	0	0	0	-p	p	0	0

Таблица 9. Скалярные базисные функции неприводимых представлений группы O_3^2 для точек позиции 48h.

HP	k _i	48h											
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
8-1	1	p	P	-P	-p	q	R	-r	-q	-R	Q	-Q	R
	2	p	-P	P	-p	-R	-Q	Q	R	q	-r	R	-q

8-3	3	-R	-Q	R	Q	p	-P	-p	P	q	-r	R	-Q
	4	q	r	-q	-r	p	P	-p	-P	-R	Q	R	-Q
	5	q	-q	r	-r	-R	R	Q	-Q	p	-p	-P	P
	6	-R	R	-Q	Q	q	-q	-r	r	p	-p	-P	P
	1	0	0	0	0	q	-q	-r	r	p	-p	-P	P
	2	0	0	0	0	-Q	-P	P	Q	Q	-p	-p	-P
8-4	3	Q	P	-Q	-P	0	0	0	0	p	-p	-P	P
	4	-p	-q	p	q	0	0	0	0	-Q	P	Q	-P
	5	p	-p	q	-q	Q	-Q	-P	P	0	0	0	0
	6	-Q	Q	-p	p	-p	p	P	P	q	0	0	0
	1	p	-P	P	-p	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	-p	-P	P	p	0	0	0	0	0	0	0	0
8-5	3	0	0	0	0	p	P	-p	-P	0	0	0	0
	4	0	0	0	0	-p	P	p	-P	0	0	0	0
	5	0	0	0	0	0	0	0	0	p	-p	-P	P
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	-p	-p	-P	P
	1	p	P	P	p	q	r	r	q	0	0	0	0
	2	p	-P	-P	p	-R	-Q	-Q	-R	0	0	0	0
9-1	3	0	0	0	0	p	P	p	P	p	p	p	p
	4	0	0	0	0	-p	P	-p	-P	p	p	p	p
	5	q	r	q	r	0	0	0	0	0	0	0	0
	6	q	-q	r	-r	-R	-R	-Q	-Q	p	p	-p	-p
	1	p	q	q	-p	p	q	-p	q	p	-p	q	q
	2	-q	-p	p	-q	-q	-p	-q	-q	p	p	-p	-q
9-2	3	-q	p	-p	-q	p	-q	-q	-q	-q	-q	-p	p
	4	p	-q	-q	-p	-q	p	-q	-p	-q	-q	p	-p
	1	0	p	-p	0	0	-p	0	p	0	0	p	-p
	2	-p	0	0	p	p	0	-p	0	0	0	p	-p
9-4	3	p	0	0	-p	0	0	p	0	-p	0	0	0
	4	0	p	-p	0	-p	0	p	0	p	0	-p	0
	1	p	0	0	p	p	0	p	0	p	0	p	0
	2	0	-p	-p	0	0	-p	0	-p	0	-p	-p	0
9-5	3	0	-p	-p	0	-p	0	-p	0	0	0	0	-p
	4	-p	0	0	-p	0	-p	0	-p	0	0	-p	-p
	1	2p	2q	2q	-2p	-p	-q	p	-q	-p	p	-q	-q
	0	0	0	0	-kp	-kq	kp	-kq	kp	-kp	kp	-kp	kq
9-6	2	-2q	-2p	2p	-2q	q	p	q	-p	-p	p	q	q
	0	0	0	0	kq	kp	kq	-kp	kp	-kp	-kp	-kq	-kq
	3	-2q	2p	-2p	-2q	-p	q	p	q	q	q	p	-p
	0	0	0	0	-kp	kq	kp	q	-kq	-kq	-kq	-kp	kp
9-6	4	2p	-2q	-2q	-2p	q	-p	q	p	q	q	-p	p
	0	0	0	0	kq	-kp	kq	kp	-kq	-kq	kp	-kp	-kp
9-6	1	0	2p	-2p	0	kq	p	kq	-p	-kq	-kq	-p	p
	2	2q	0	0	2q	-q	-kp	-q	-kp	-q	-q	kp	-kp

		0	-2q	-2q	0	-kp	q	kp	q	q	q	kp	-kp
	3	2p	0	0	-2p	-kq	p	-kq	-p	p	-p	kq	kq
		0	-2q	-2q	0	q	kp	q	-kp	-kp	kp	q	q
	4	0	2p	-2p	0	p	-kq	-p	-kq	-p	p	kq	kq
		-2q	0	0	-2q	kp	q	-kp	q	kp	-kp	q	q
10-1	1	p	-p	-p	p	q	-q	-q	q	q	-q	-q	q
	2	q	-q	q	-q	p	p	-p	-p	q	-q	q	-q
	3	q	q	-q	-q	q	q	-q	-q	p	p	-p	-p
10-4	1	0	0	0	0	p	p	p	p	p	p	p	p
	2	p	p	p	p	0	0	0	0	p	p	p	p
	3	p	p	p	p	p	p	p	p	0	0	0	0
10-5	1	0	0	0	0	p	-p	-p	-p	-p	-p	-p	-p
	2	-p	p	-p	p	0	0	0	0	p	-p	p	-p
	3	p	p	-p	-p	-p	-p	p	p	0	0	0	0
10-7	1	p	p	p	p	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	p	p	p	p	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	0	0	0	0	p	p	p	p
10-8	1	0	0	0	0	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p
	2	-p	-p	-p	-p	0	0	0	0	p	p	p	p
	3	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p	0	0	0	0
10-9	1	0	0	0	0	0	0	0	0	p	-p	p	-p
		0	0	0	0	p	p	-p	-p	0	0	0	0
	2	p	p	-p	-p	0	0	0	0	0	0	0	0
		0	0	0	0	0	0	0	0	p	-p	-p	p
	3	0	0	0	0	p	-p	-p	-p	0	0	0	0
		p	-p	p	-p	0	0	0	0	0	0	0	0
10-10	1	p	-p	p	-p	q	-q	q	-q	0	0	0	0
		-p	-p	p	p	0	0	0	0	-q	-q	q	q
	2	0	0	0	0	p	p	-p	-p	q	q	-q	-q
		-q	q	-q	q	-p	p	p	-p	0	0	0	0
	3	q	-q	-q	q	0	0	0	0	p	-p	-p	p
		0	0	0	0	-q	q	-q	q	-p	-p	-p	p
11-1	1	p	p	p	p	p	p	p	p	p	p	p	p
11-4	1	p	p	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p	-p	-p
11-5	1	2p	2p	-p	-p	-p	-p	2p	2p	-p	-p	-p	-p
		0	0	-kp	-kp	kp	kp	0	0	-kp	-kp	kp	kp
11-7	1	0	0	0	0	0	0	0	0	p	p	-p	-p
		0	0	0	0	p	-p	p	-p	0	0	0	0
		p	-p	-p	p	0	0	0	0	0	0	0	0
11-8	1	p	p	-p	-p	-p	-p	p	p	0	0	0	0
		-p	p	-p	p	0	0	0	0	p	-p	p	-p
		0	0	0	0	p	-p	-p	p	p	p	-p	-p
11-10	1	p	p	-p	-p	p	p	-p	-p	0	0	0	0
		p	-p	p	-p	0	0	0	0	p	-p	p	-p
		0	0	0	0	p	-p	-p	p	-p	-p	p	p

Таблица 10. Скалярные базисные функции неприводимых представлений группы O_h для точек позиции 48i.

HP	48i
----	-----

	k_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
8-1	1	0	0	0	0	p	q	q	q	-p	-p	-p	-q
	2	0	0	0	0	-q	-p	-p	-q	p	q	q	p
	3	-q	-p	-q	-p	0	0	0	0	p	q	p	q
	4	p	q	p	q	0	0	0	0	-q	-p	-q	-p
8-2	5	p	p	q	q	-q	-q	-p	-p	0	0	0	0
	6	-q	-q	-p	-p	p	p	q	q	0	0	0	0
	1	p	-p	-p	p	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	p	-p	-p	p	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	p	-p	p	-p	0	0	0	0
	4	0	0	0	0	p	-p	p	-p	0	0	0	0
8-3	5	0	0	0	0	0	0	0	0	p	p	-p	-p
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	p	p	-p	-p
	1	p	p	p	p	q	r	r	q	r	q	q	r
	2	-p	-p	-p	-p	-r	-q	-q	-r	-q	-r	-r	-q
	3	r	q	r	q	p	p	p	p	q	r	q	r
	4	-q	-r	-q	-r	-p	-p	-p	-p	-r	-q	-r	-q
8-5	5	q	q	r	r	r	r	q	q	p	p	p	p
	6	-r	-r	-q	-q	-q	-q	-r	-r	-p	-p	-p	-p
	1	p	p	-p	-p	q	r	-r	-q	0	0	0	0
	2	-p	p	-p	p	0	0	0	0	-r	q	-q	r
	3	0	0	0	0	p	-p	-p	p	q	-r	-q	r
	4	0	0	0	0	p	-p	-p	p	0	0	0	0
9-1	5	q	-q	r	-r	0	0	0	0	p	-p	p	-p
	6	-r	r	-q	q	0	0	0	0	-p	p	-p	p
	1	p	0	0	0	-q	q	r	-r	-p	p	p	-p
	2	0	p	-p	0	0	p	0	-p	-p	p	0	0
	3	0	-p	p	0	-p	0	p	0	0	0	p	-p
	4	-p	0	0	p	0	-p	0	p	0	0	-p	p
9-3	1	0	p	-p	0	0	0	0	p	0	0	p	-p
	2	p	0	0	-p	0	p	0	0	0	0	-p	p
	3	-p	0	0	p	0	p	0	-p	p	-p	0	0
	4	0	-p	p	0	p	0	-p	0	-p	p	0	0
9-4	1	p	q	q	p	p	q	p	q	p	p	q	q
	2	q	p	p	q	q	p	q	p	p	p	q	q
	3	q	p	p	q	q	p	q	p	q	q	q	p
	4	p	q	q	p	q	p	q	p	q	q	q	p
9-5	1	2p	0	0	-2p	-p	kq	p	-kq	-p	p	kq	-kq
		0	-2q	2q	0	-kp	-q	kp	q	kp	-kp	q	-q
	2	0	2p	-2p	0	kq	-p	-kq	p	p	-p	-kq	kq
		-2q	0	0	2q	-q	-kp	q	kp	-kp	kp	-q	q
3	0	-2p	2p	0	p	-kq	-p	kq	kq	-kq	-p	p	p
	2q	0	0	-2q	kp	q	-kp	-q	q	-q	kp	-kp	
4	-2p	0	0	2p	-kq	p	kq	-p	-kq	kq	p	-p	-p
	0	2q	-2q	0	q	kp	-q	-kp	-q	q	-kp	q	kp

9-6	1	0	0	0	0	kp	kq	kp	kq	-kp	-kp	-kq	-kq
	2	0	0	0	0	kq	kp	kq	kp	-kp	-kp	-kq	-kq
		2q	2p	2p	2q	-q	-p	-q	-p	-p	-p	-q	-q
	3	0	0	0	0	kp	kq	kp	kq	-kp	-kp	-kq	-kp
2q		2p	2p	2q	-p	-q	-p	-q	-q	-q	-p	-p	
4	0	0	0	0	kq	kp	kq	kp	-kp	-kp	-kq	-kp	
	2p	2q	2q	2p	-q	-p	-q	-p	-q	-q	-p	-p	
10-1	1	p	p	p	p	q	q	q	q	q	q	q	q
	2	q	q	q	q	p	p	p	p	q	q	q	q
	3	q	q	q	q	q	q	q	q	p	p	p	p
10-4	1	0	0	0	0	p	-p	-p	p	p	-p	-p	p
	2	p	-p	p	-p	0	0	0	0	p	-p	p	-p
10-5	1	0	0	0	0	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p
	2	-p	-p	-p	-p	0	0	0	0	p	p	p	p
	3	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p	0	0	0	0
10-7	1	p	-p	-p	p	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	p	-p	p	-p	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	0	0	0	0	p	p	-p	-p
10-8	1	0	0	0	0	p	-p	-p	p	-p	p	p	-p
	2	-p	p	-p	p	0	0	0	0	p	-p	p	-p
	3	p	p	-p	-p	-p	-p	p	p	0	0	0	0
10-9	1	0	0	0	0	0	0	0	0	p	p	-p	-p
	2	0	0	0	0	p	-p	p	-p	0	0	0	0
		p	-p	-p	p	0	0	0	0	0	0	0	0
10-10	1	p	p	-p	-p	q	q	-q	-q	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	p	-p	-p	p	q	q	-q	q
	3	q	-q	q	-q	0	0	0	0	p	-p	p	-p
11-1	1	p	p	p	p	p	p	p	p	p	p	p	
11-5	1	2p	2p	2p	2p	-p	-p	-p	-p	-p	-p	-p	-p
	0	0	0	0	0	-kp	-kp	-kp	-kp	kp	kp	kp	kp
11-7	1	0	0	0	0	0	0	0	0	p	p	-p	-p
	0	0	0	0	0	p	-p	p	-p	0	0	0	0
11-8	1	p	p	-p	-p	-p	-p	p	p	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	p	-p	-p	p	-p	p	p	-p
11-10	1	p	p	-p	-p	p	p	-p	-p	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	p	-p	-p	p	-p	p	p	-p

Таблица 11. Скалярные базисные функции неприводимых представлений группы O_h^5 для точек позиции 96j.

HP	k_i	96j							
		1	2	3	4	5	6	7	8
8-1	1	p	p	p	p	q	r	r	q
	2	-p	-p	-p	-p	-r	-q	-q	-r
	3	s	t	s	t	p	p	p	p
	4	-t	-s	-t	-s	-p	-p	-p	-p
	5	q	q	r	r	s	s	t	t
	6	-r	-r	-q	-q	-t	-t	-s	-s
8-2	1	p	-p	-p	p	0	0	0	0
	2	p	-p	-p	p	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	p	-p	p	-p
	4	0	0	0	0	0	p	-p	p
	5	0	0	0	0	0	0	0	0
	6	0	0	0	0	0	0	0	0
8-3	1	p	p	p	p	q	r	r	q
	2	-p	-p	-p	-p	-r	-q	-q	-r
	3	s	t	s	t	p	p	p	p
	4	-t	-s	-t	-s	-p	-p	-p	-p
	5	q	q	r	r	s	s	t	t
	6	-r	-r	-q	-q	-t	-t	-s	-s
8-4	1	p	-p	-p	p	0	0	0	0
	2	p	-p	-p	p	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	p	-p	p	-p
	4	0	0	0	0	0	p	-p	p
	5	0	0	0	0	0	0	0	0
	6	0	0	0	0	0	0	0	0
8-5	1	p	p	-p	-p	q	r	-r	-q
	s	-s	s	-s	0	0	0	0	
	2	-p	-p	p	p	-r	-q	q	r
	s	-s	s	-s	0	0	0	0	
	3	0	0	0	0	p	-p	-p	p
	t	u	-t	-u	s	s	-s	-s	
4	0	0	0	0	p	-p	-p	p	
-u	-t	u	t	-s	-s	s	s		
5	q	-q	r	-r	0	0	0	0	
0	0	0	0	t	-t	-u	u		
6	-r	r	-q	q	0	0	0	0	
0	0	0	0	u	-u	-t	t		
9-1	1	p	q	-q	-p	p	-q	-p	q
	2	q	p	-p	-q	-q	p	q	-p
	3	-q	-p	p	q	-p	q	p	-q
	4	-p	-q	q	p	q	-p	-q	p
9-2	1	p	q	q	p	p	q	p	q
	2	q	p	p	q	q	p	q	p
	3	q	p	p	q	p	q	p	q
	4	p	q	q	p	q	p	q	p
9-3	1	p	q	-q	-p	p	-q	-p	q

	2	q	p	-p	-q	-q	p	q	-p
	3	-q	-p	p	q	-p	q	p	-q
	4	-p	-q	q	p	q	-p	-q	p
9-4	1	p	q	q	p	p	q	p	q
	2	q	p	p	q	q	p	q	p
	3	q	p	p	q	p	q	p	q
	4	p	q	q	p	q	p	q	p
9-5	1	2p-r kr	2q+s -ks	-2q-s ks	-2p+r -kr	-p+2r -kp	q+2s kq	p-2r kp	-q-2s -kq
	2	2q+s -ks	2p-r kr	-2p+r -kr	-2q-s ks	q+2s kq	-p+2r -kp	-q-2s -kq	p-2r kp
	3	-2q-s ks	-2p+r -kr	2p-r kr	2q+s -ks	p-2r kp	-q-2s -kq	-p+2r -kp	q+2s kq
	4	-2p+r -kr	-2q-s ks	2q+s -ks	2p-r kr	-q-2s -kp	p-2r kp	q+2s kq	-p+2r -kp
9-6	1	2p-r kr	2q-s ks	2q-s ks	2p-r kr	-p+2r -kp	-q+2s -kq	-p+2r -kp	-q+2s -kq
	2	2q-s ks	2p-r kr	2p-r kr	2q-s ks	-q+2s -kp	-p+2r -kq	-q+2s -kp	-p+2r -kp
	3	2q-s ks	2p-r kr	2p-r kr	2q-s ks	-p+2r -kp	-q+2s -kq	-p+2r -kp	-q+2s -kq
	4	2p-r kr	2q-s ks	2q-s ks	2p-r kr	-q+2s -kq	-p+2r -kp	-q+2s -kq	-p+2r -kp
10-1	1	p	p	p	p	q	q	q	q
	2	r	r	r	r	p	p	p	p
	3	q	q	q	q	r	r	r	r
10-3	1	p	-p	-p	p	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	p	-p	p	-p
	3	0	0	0	0	0	0	0	0
10-4	1	0	0	0	0	p	-p	-p	p
	2	q	-q	q	-q	0	0	0	0
	3	p	p	-p	-p	q	q	-q	-q
10-5	1	p	p	p	p	q	q	q	q
	2	r	r	r	r	p	p	p	p
	3	q	q	q	q	r	r	r	r
10-7	1	p	-p	-p	p	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	p	-p	p	-p
	3	0	0	0	0	0	0	0	0
10-8	1	0	0	0	0	p	-p	-p	p
	2	q	-q	q	-q	0	0	0	0
	3	p	p	-p	-p	q	q	-q	-q
10-9	1	0	0	0	0	0	0	0	0
		0	0	0	0	q	-q	q	-q
	2	p	-p	-p	p	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	
	3	0	0	0	0	p	-p	-p	p
		q	-q	-q	q	0	0	0	0
10-10	1	p	p	-p	-p	q	q	-q	-q
		r	-r	r	r	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	p	-p	-p	p
		s	s	-s	-s	r	r	-r	-r

	3	q	-q	q	-q	0	0	0	0
		0	0	0	0	s	s	-s	-s
11-1	1	p	p	p	p	p	p	p	p
11-3	1	p	p	p	p	p	p	p	p
11-5	1	2p-q kq	2p-q kq	2p-q kq	2p-q kq	-p+2q -kp	-p+2q -kp	-p+2q -kp	-p+2q -kp
11-7	1	0	0	0	0	0	0	0	0
		0	0	0	0	p	-p	p	-p
		p	-p	-p	p	0	0	0	0
11-8	1	p	p	-p	-p	q	q	-q	-q
		q	-q	q	-q	0	0	0	0
		0	0	0	0	p	-p	-p	p
11-9	1	0	0	0	0	0	0	0	0
		0	0	0	0	p	-p	p	-p
		p	-p	-p	p	0	0	0	0
11-10	1	p	p	-p	-p	q	q	-q	-q
		q	-q	q	-q	0	0	0	0
		0	0	0	0	p	-p	-p	p

HP		96j								
		k _i	9	10	11	12	13	14	15	16
8-1	1	s	t	t	s	-p	-p	-p	-p	
	2	-t	-s	-s	-t	p	p	p	p	
	3	q	r	q	r	-q	-r	-q	-r	
	4	-r	-q	-r	-q	r	q	r	q	
	5	p	p	p	p	-s	-s	-t	-t	
	6	-p	-p	-p	-p	t	t	s	s	
8-2	1	0	0	0	0	p	-p	-p	p	
	2	0	0	0	0	p	-p	-p	p	
	3	0	0	0	0	0	0	0	0	
	4	0	0	0	0	0	0	0	0	
	5	p	p	-p	-p	0	0	0	0	
	6	p	p	-p	-p	0	0	0	0	
8-3	1	s	t	t	s	p	p	p	p	
	2	-t	-s	-s	-t	-p	-p	-p	-p	
	3	q	r	q	r	q	r	q	r	
	4	-r	-q	-r	-q	-r	-q	-r	-q	
	5	p	p	p	p	s	s	t	t	
	6	-p	-p	-p	-p	-t	-t	-s	-s	
8-4	1	0	0	0	0	-p	p	p	-p	
	2	0	0	0	0	-p	p	p	-p	
	3	0	0	0	0	0	0	0	0	
	4	0	0	0	0	0	0	0	0	
	5	p	p	-p	-p	0	0	0	0	
	6	p	p	-p	-p	0	0	0	0	
8-5	1	0	0	0	0	s	s	-s	-s	
		t	-u	u	-t	p	-p	p	-p	
	2	0	0	0	0	-s	-s	s	s	
		u	-t	t	-u	p	-p	p	-p	
	3	q	-r	-q	r	0	0	0	0	
		0	0	0	0	q	r	-q	-r	

	4	r	-q	-r	q	0	0	0	0
	5	p	-p	p	-p	t	-t	u	-u
	6	s	-s	-s	s	0	0	0	0
		-p	p	-p	p	-u	u	-t	t
9-1	1	p	r	q	q	p	q	q	-r
	2	-p	p	-q	q	q	-p	p	-q
	3	q	-q	p	-p	-q	p	-p	q
	4	-q	q	-p	p	p	-q	q	-p
9-2	1	0	0	p	-p	0	-p	p	0
	2	p	p	q	q	-q	-p	-p	-q
	3	q	q	p	p	-q	-p	-p	-q
	4	q	q	p	p	-p	-q	-q	-p
9-3	1	0	0	p	-p	0	p	-p	0
	2	-p	p	-q	q	-q	p	-p	q
	3	q	-q	p	-p	q	-p	p	-q
	4	-q	q	-p	p	-p	q	-q	p
9-4	1	p	p	q	q	p	q	q	p
	2	p	p	q	q	q	p	p	q
	3	q	q	p	p	q	p	p	q
	4	q	q	p	p	p	q	q	p
9-5	1	-p-r	p+r	-q+s	q-s	-2p+r	2q+s	-2q-s	2p-r
	2	kp-kr	-kp+kr	kq+ks	-kq-ks	kr	ks	-ks	-kr
		p+r	-p-r	q-s	-q+s	2q+s	-2p+r	2p-r	-2q-s
	3	-q+s	q-s	-p-r	-kp+kr	-ks	2p-r	-2p+r	2q+s
4	q-s	-q+s	p+r	-p-r	2p-r	-2q-s	2q+s	-2p+r	
9-6	1	-p-r	-p-r	-q-s	-q-s	-2p+r	-2q+s	-2q+s	-2p+r
	2	kp-kr	kp-kr	kq-ks	kq-ks	kr	ks	ks	kr
		-p-r	-p-r	-q-s	-q-s	-2q+s	-2p+r	-2p+r	-2q+s
	3	-q-s	-q-s	-p-r	-p-r	-2q+s	-2p+r	-2p+r	-2q+s
4	-q-s	-q-s	-p-r	-p-r	-2p+r	-2q+s	-2q+s	-2p+r	
10-1	1	r	r	r	r	p	p	p	p
	2	q	q	q	q	q	q	q	q
	3	p	p	p	p	r	r	r	r
10-3	1	0	0	0	0	-p	p	p	-p
	2	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	-p	p	p	-p	0	0	0	0
10-4	1	q	-q	-q	q	0	0	0	0
	2	p	-p	p	-p	-p	p	-p	p
	3	0	0	0	0	-q	-q	q	q
10-5	1	r	r	r	r	-p	-p	-p	-p
	2	q	q	q	q	-q	-q	-q	-q
	3	p	p	p	p	-r	-r	-r	-r
10-7	1	0	0	0	0	p	-p	-p	p

10-8	2	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	p	p	-p	-p	0	0	0	0
	1	q	-q	-q	q	0	0	0	0
	2	p	-p	p	-p	p	-p	p	-p
10-9	3	0	0	0	0	q	q	-q	-q
	1	p	p	-p	-p	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	0	0	0	0
10-10	1	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	q	-q	-q	q	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	0
11-1	1	p	p	p	p	p	p	p	p
11-3	1	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p
11-5	1	-p-q	-p-q	-p-q	-p-q	2p-q	2p-q	2p-q	2p-q
	kp-kq	kp-kq	kp-kq	kp-kq	-kq	-kq	-kq	-kq	
11-7	1	p	p	-p	-p	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	p	-p	-p	p
11-8	1	0	0	0	0	q	q	-q	-q
	2	p	-p	p	-p	p	-p	p	-p
11-9	1	p	p	-p	-p	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	-p	p	p	-p
11-10	1	0	0	0	0	-q	-q	q	q
	2	p	-p	p	-p	-p	p	-p	p
	3	q	-q	-q	q	0	0	0	0

HP		96j							
	k _i	17	18	19	20	21	22	23	24
8-1	1	-s	-t	-t	-s	-q	-r	-r	-q
	2	t	s	s	t	r	q	q	r
	3	-p	-p	-p	-p	-s	-t	-s	-t
	4	p	p	p	p	t	s	t	s
	5	-q	-q	-r	-r	-p	-p	-p	-p
	6	r	r	q	q	p	p	p	p
8-2	1	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	p	-p	p	-p	0	0	0	0
	4	p	-p	p	-p	0	0	0	0
	5	0	0	0	0	p	p	-p	-p
	6	0	0	0	0	p	p	-p	-p
8-3	1	s	t	t	s	q	r	r	q
	2	-t	-s	-s	-t	-r	-q	-q	-r
	3	p	p	p	p	s	t	s	t

	4	-p	-p	-p	-p	-t	-s	-t	-s
	5	q	q	r	r	p	p	p	p
	6	-r	-r	-q	-q	-p	-p	-p	-p
8-4	1	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	-p	p	-p	p	0	0	0	0
	4	-p	p	-p	p	0	0	0	0
	5	0	0	0	0	-p	-p	p	p
	6	0	0	0	0	-p	-p	p	p
8-5	1	t	u	-u	-t	0	0	0	0
		0	0	0	0	q	-r	r	-q
	2	-u	-t	t	u	0	0	0	0
		0	0	0	0	r	-q	q	-r
	3	s	-s	-s	s	t	-u	-t	u
		p	p	-p	-p	0	0	0	0
	4	s	-s	-s	s	u	-t	-u	t
		-p	-p	p	p	0	0	0	0
	5	0	0	0	0	s	-s	s	-s
		q	-q	-r	r	p	-p	-p	p
	6	0	0	0	0	-s	s	-s	s
		r	-r	-q	q	p	-p	-p	p
9-1	1	-p	-q	p	q	-p	p	q	-q
	2	-q	-p	q	p	p	-p	-q	q
	3	p	q	-p	-q	q	-q	-p	p
	4	q	p	-q	-p	-q	q	p	-p
9-2	1	-p	-q	-p	-q	-p	-p	-q	-q
	2	-q	-p	-q	-p	-p	-p	-q	-q
	3	-p	-q	-p	-q	-q	-q	-p	-p
	4	-q	-p	-q	-p	-q	-q	-p	-p
9-3	1	p	q	-p	-q	p	-p	-q	q
	2	q	p	-q	-p	p	p	q	-q
	3	-p	-q	p	q	-q	q	p	-p
	4	-q	-p	q	p	q	-q	-p	p
9-4	1	p	q	p	q	p	p	q	q
	2	q	p	q	p	p	p	q	q
	3	p	q	p	q	q	q	p	p
	4	q	p	q	p	q	q	p	p
9-5	1	p+r	q-s	-p-r	-q+s	p-2r	-p+2r	-q-2s	q+2s
		kp-kr	kq+ks	-kp+kr	-kq-ks	-kp	kp	kq	-kq
	2	q-s	p+r	-q+s	-p-r	-p+2r	p-2r	q+2s	-q-2s
		kq+ks	kp-kr	-kq-ks	-kp+kr	kp	-kp	-kq	kq
	3	-p-r	-q+s	p+r	q-s	-q-2s	q+2s	p-2r	-p+2r
	-kp+kr	-kq-ks	kp-kr	kq+ks	kq	-kq	-kp	kp	
	4	-q+s	-p-r	q-s	p+r	q+2s	-q-2s	-p+2r	p-2r
	-kq-ks	-kp+kr	kq+ks	kp-kr	-kq	kq	kp	-kp	
9-6	1	p+r	q+s	p+r	q+s	p-2r	p-2r	q-2s	q-2s
		kp-kr	kq-ks	kp-kr	kq-ks	-kp	-kp	-kq	-kq
	2	q+s	p+r	q+s	p+r	p-2r	p-2r	q-2s	q-2s
	kq-ks	kp-kr	kq-ks	kp-kr	-kp	-kp	-kq	-kq	
	3	p+r	q+s	p+r	q+s	q-2s	q-2s	p-2r	p-2r
	kp-kr	kq-ks	kp-kr	kq-ks	-kq	-kq	-kp	-kp	

	4	q+s	p+r	q+s	p+r	q-2s	q-2s	p-2r	p-2r
		kq-ks	kp-kr	kq-ks	kp-kr	-kq	-kq	-kp	-kp
10-1	1	r	r	r	r	q	q	q	q
	2	p	p	p	p	r	r	r	r
	3	q	q	q	q	p	p	p	p
10-3	1	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	-p	p	-p	p	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	-p	-p	p	p
10-4	1	-q	q	q	-q	-p	p	p	-p
	2	0	0	0	0	-q	q	-q	q
	3	-p	-p	p	p	0	0	0	0
10-5	1	-r	-r	-r	-r	-q	-q	-q	-q
	2	-p	-p	-p	-p	-r	-r	-r	-r
	3	-q	-q	-q	-q	-p	-p	-p	-p
10-7	1	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	p	-p	p	-p	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	p	p	-p	-p
10-8	1	q	-q	-q	q	p	-p	-p	p
	2	0	0	0	0	q	-q	q	-q
	3	p	p	-p	-p	0	0	0	0
10-9	1	0	0	0	0	q	q	-q	-q
		p	-p	p	-p	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	q	-q	q	-q	0	0	0	0
		0	0	0	0	0	0	0	0
10-10	1	s	s	-s	-s	0	0	0	0
		0	0	0	0	q	-q	q	-q
	2	r	-r	-r	r	s	-s	-s	s
	3	p	p	-p	-p	0	0	0	0
		q	-q	-q	q	p	p	-p	-p
11-1	1	p	p	p	p	p	p	p	p
11-3	1	-p	-p	-p	-p	-p	-p	-p	-p
11-5	1	-p-q	-p-q	-p-q	-p-q	-p+2q	-p+2q	-p+2q	-p+2q
		-kp+kq	-kp+kq	-kp+kq	-kp+kq	kp	kp	kp	kp
11-7	1	0	0	0	0	p	p	-p	-p
		p	-p	p	-p	0	0	0	0
		0	0	0	0	0	0	0	0
11-8	1	p	p	-p	-p	0	0	0	0
		0	0	0	0	q	-q	q	-q
		q	-q	-q	q	p	-p	-p	p
11-9	1	0	0	0	0	-p	-p	p	p
		-p	p	-p	p	0	0	0	0
		0	0	0	0	0	0	0	0
11-10	1	-p	-p	p	p	0	0	0	0
		0	0	0	0	-q	q	-q	q
		-q	q	q	-q	-p	p	p	p

Таблица 12. Скалярные базисные функции неприводимых представлений группы O_h^s для точек позиции 96k.

НП	k _i	96k							
		1	2	3	4	5	6	7	8
8-1	1	p	P	-P	-p	q	r	-r	-q
	2	p	-P	P	-p	-R	-Q	Q	R
	3	-R	-Q	R	Q	p	-P	-p	P
	4	q	r	-q	-r	p	P	-p	-P
	5	q	-q	r	-r	-R	R	Q	-Q
	6	-R	R	-Q	Q	q	-q	-r	r
8-2	1	p	P	-P	-p	q	r	-r	-q
	2	p	-P	P	-p	-R	-Q	Q	R
	3	-R	-Q	R	Q	p	-P	-p	P
	4	q	r	-q	-r	p	-P	-p	P
	5	q	-q	r	-r	-R	R	Q	-Q
	6	-R	R	-Q	Q	q	-q	-r	r
8-3	1	p	-P	P	-p	q	r	-r	-q
	2	-p	-P	P	p	-R	-Q	Q	R
	3	R	Q	-R	-Q	p	P	-p	-P
	4	-q	-r	q	r	-p	P	p	-P
	5	q	-q	r	-r	R	-R	-Q	Q
	6	-R	R	-Q	Q	-q	q	r	-r
8-4	1	p	-P	P	-p	q	r	-r	-q
	2	-p	-P	P	p	-R	-Q	Q	R
	3	R	Q	-R	-Q	p	P	-p	-P
	4	-q	-r	q	r	-p	P	p	-P
	5	q	-q	r	-r	R	-R	-Q	Q
	6	-R	R	-Q	Q	-q	q	r	-r
8-5	1	p	q	q	p	r	s	s	r
	2	-Q	-P	-P	-Q	-U	-T	-T	-U
	3	-P	-q	-q	-p	-t	-u	-u	-t
	4	U	T	U	T	Q	P	Q	P
	5	r	r	s	s	t	t	u	u
	6	-U	-U	-T	-T	-S	-S	-R	-R
9-1	1	p	q	q	r	p	q	r	q
	2	-q	-p	-r	-q	-q	-p	-q	-r
	3	-q	-r	-p	-q	-r	-q	-p	-q
	4	-r	-q	-q	-p	-q	-r	-q	-p
9-2	1	0	p	-p	0	0	-p	0	p
	2	-p	0	0	p	p	0	-p	0
	3	p	0	0	-p	0	-p	0	p
	4	0	p	-p	0	-p	0	p	0
9-3	1	0	p	-p	0	0	-p	0	p

9-4	2	-p	0	0	p	p	0	-p	0
	3	p	0	0	-p	0	-p	0	p
	4	0	p	-p	0	-p	0	p	0
	1	p	q	q	r	p	q	r	q
9-5	2	-q	-p	-r	-q	-q	-p	-q	-r
	3	-q	-r	-p	-q	-r	-q	-p	-q
	4	-r	-q	-q	-p	-q	-r	-q	-p
	1	2p	2q-s	2q-s	2r	-p	-q+2s	-r	-q
9-6	2	0	-ks	ks	0	-kp	-kq	-kr	-kq+ks
	3	-2q+s	-2p	-2r	-2q+s	q-2s	p	q+s	r
	4	-2q+s	-2r	-2p	-2q+s	r	q+s	kp	q-2s
	1	0	2p+r	-2p-r	0	kq	p+2r	ks	-p+r
9-7	2	2q	kr	kq	2s	-q	kp	-s	-kp-kr
	3	-2p-r	0	0	2p+r	-p-2r	-kq	p-r	-ks
	4	-kr	-2q	-2s	-kr	-kp	q	kp+kr	s
	1	2p+r	0	0	-2p-r	-ks	p-r	-kq	-p-2r
10-1	2	0	2p+r	-2p-r	0	p-r	q	-p-2r	-kp
	3	-2s	-kr	-kr	-2q	s	kp+kr	s	-kq
	4	0	2p+r	-2p-r	0	p-r	-ks	-p-2r	-kq
	1	-2s	-kr	-kr	-2q	kp+kr	s	-kp	q
10-2	1	p	-p	-p	p	q	-q	-q	q
	2	q	-q	q	-q	p	-p	p	-p
	3	q	q	-q	-q	q	q	-q	-q
10-3	1	0	0	0	0	p	p	p	p
	2	-p	p	-p	p	0	0	0	0
	3	p	p	-p	-p	-p	-p	p	p
10-4	1	0	0	0	0	p	p	p	p
	2	-p	p	-p	p	0	0	0	0
	3	p	p	-p	-p	-p	-p	p	p
10-5	1	p	p	p	p	q	q	q	q
	2	q	q	q	q	p	p	p	p
	3	q	q	q	q	q	q	q	q
10-6	1	0	0	0	0	p	p	p	p
	2	-p	p	-p	p	0	0	0	0
	3	p	p	-p	-p	-p	-p	p	p
10-7	1	p	-p	-p	p	q	-q	-q	q
	2	q	-q	q	-q	p	-p	p	-p
	3	q	q	-q	-q	q	q	q	-q
10-8	1	p	p	p	p	q	q	q	q
	2	q	q	q	q	p	p	p	p
	3	q	q	q	q	q	q	q	q
10-9	1	0	0	0	0	p	p	p	p
	2	-p	-p	-p	-p	0	0	0	0
	3	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p
10-10	1	p	-p	p	-p	q	-q	q	-q
	2	p	p	-p	-p	r	r	-r	-r
10-11	1	r	r	-r	-r	p	p	-p	-p
	2	q	-q	-q	q	p	-p	-p	p

	3	q	-q	-q	q	r	-r	-r	r
10-10	1	q	-r	r	-r	q	-q	q	-q
		p	-p	p	-p	q	-q	q	-q
	2	r	r	-r	-r	p	p	-p	-p
3	1	-q	q	q	-q	-p	p	p	-p
	2	q	-q	-q	q	r	-r	-r	r
11-1	1	p	p	p	p	p	p	p	p
11-4	1	p	p	p	p	p	p	p	p
11-5	1	2p	2p	2p	2p	-kp	-kp	-kp	-kp
		0	0	0	0	kp	kp	kp	kp
11-6		0	0	0	0	kp	kp	kp	kp
		2p	2p	2p	2p	-p	-p	-p	-p
11-7	1	p	p	-p	-p	p	p	-p	-p
		p	-p	p	-p	q	-q	q	-q
		q	-q	-q	q	p	-p	-p	p
11-8	1	p	p	-p	-p	0	0	0	0
		-p	p	-p	p	0	0	0	0
		0	0	0	0	p	-p	-p	p
11-9	1	p	p	-p	-p	0	0	0	0
		-p	p	-p	p	0	0	0	0
		0	0	0	0	p	-p	-p	p
11-10	1	p	p	-p	-p	p	p	-p	-p
		p	-p	p	-p	q	-q	q	-q
		q	-q	-q	q	p	-p	-p	p

HP		96k								
	k ₁	9	10	11	12	13	14	15	16	
8-1	1	-R	Q	-Q	R	p	-p	-p	p	
	2	q	-r	r	-q	p	-p	-p	p	
	3	q	-r	-q	r	Q	r	Q	r	
	4	-R	Q	R	-Q	-r	-Q	-r	-Q	
	5	p	-p	P	-P	-r	-r	-Q	-Q	
	6	p	-p	-P	P	Q	Q	r	r	
8-2	1	-R	Q	-Q	R	-p	p	p	-p	
	2	q	-r	r	-q	-p	p	p	-p	
	3	q	-r	-q	r	-Q	-r	-Q	-r	
	4	-R	Q	R	-Q	r	Q	r	Q	
	5	p	-p	P	-P	r	r	Q	Q	
	6	p	-p	-P	P	-Q	-Q	-r	-r	
8-3	1	R	-Q	Q	-R	-p	-p	-p	-p	
	2	-q	r	-r	q	p	p	p	p	
	3	q	-r	-q	r	-Q	-r	-Q	-r	
	4	-R	Q	R	-Q	r	Q	r	Q	
	5	p	-p	-P	P	-r	-r	-Q	-Q	
	6	-p	p	-P	P	Q	Q	r	r	
8-4	1	R	-Q	Q	-R	p	p	p	p	
	2	-q	r	-r	q	-p	-p	-p	-p	

	3	q	-r	-q	r	Q	r	Q	r
8-5	4	-R	Q	R	-Q	-r	-Q	Q	-r
	5	p	-p	-P	P	r	r	Q	Q
	6	-p	p	-P	P	-Q	-Q	-r	-r
	1	t	u	u	t	Q	p	-p	-Q
	2	-U	-T	-T	-U	-p	-Q	Q	p
	3	-r	-s	-s	-r	Q	p	-p	Q
9-1	4	-U	-T	-U	-T	-u	T	u	-T
	3	R	S	R	S	-u	T	u	-T
	4	S	R	S	R	-T	-s	R	s
	5	t	u	t	u	s	u	T	-u
	6	-Q	-Q	-P	-P	T	-T	-u	u
	1	p	r	q	q	p	q	q	-r
9-2	2	-r	-p	-q	-q	q	p	-r	q
	3	-q	-q	-p	-r	q	-r	p	q
	4	-q	-q	-r	-p	-r	q	q	p
	1	0	0	p	-p	0	-p	p	0
9-3	2	0	0	p	-p	0	0	0	p
	3	-p	p	0	0	p	0	0	-p
	4	p	-p	0	0	0	0	0	p
	1	p	r	q	q	-p	-q	-q	r
9-4	2	-r	-p	-q	-q	-q	-p	r	-q
	3	-q	-q	-p	-r	-q	r	-p	-q
	4	-q	-q	-r	-p	r	-q	-q	-p
	1	-p	-r	-q+2s	-q-s	2p	2q-s	2q-s	-2r
9-5	2	kp	kr	kq	kq-ks	0	-ks	ks	0
	3	r	p	q+s	q-2s	2q-s	2p	-2r	2q-s
	4	-kr	-kp	-kq+ks	-kp	-ks	0	0	ks
	1	q-2s	q+s	p	r	2q-s	-2r	2p	2q-s
9-6	2	-kq	-ks	-p-2r	p-r	0	-2p-r	2p+r	0
	3	q+s	q-2s	r	p	-2r	2q-s	2q-s	2p
	4	-kq+ks	-kq	-kr	-kp	0	ks	-ks	0
	1	ks	kq	-p+r	p+2r	-2p-r	0	0	2p+r
10-1	2	s	q	kp+kr	-kp	-2q	-kr	-kr	2s
	3	p+2r	-p+r	kq	ks	2p+r	0	0	-2p-r
	4	-kp	kp+kr	q	s	-kr	2s	-2q	-kr
	1	-p+r	p+2r	ks	kq	0	2p+r	-2p-r	0
10-1	2	kp+kr	-kp	s	q	2s	-kr	-kr	-2q
	1	q	-q	-q	q	p	p	p	p
	2	q	-q	q	-q	-q	-q	-q	-q
3	p	p	-p	-p	-q	-q	-q	-q	

10-2	1	-p	p	p	-p	0	0	0	0
	2	p	-p	p	-p	-p	-p	-p	-p
	3	0	0	0	0	p	p	p	p
10-3	1	-p	-p	-p	-p	0	0	0	0
	2	p	p	p	p	p	-p	p	-p
	3	0	0	0	0	-p	-p	p	p
10-4	1	q	q	q	q	-p	p	p	-p
	2	q	q	q	q	q	-q	q	-q
	3	p	p	p	p	q	q	-q	-q
10-5	1	-p	p	p	-p	0	0	0	0
	2	p	-p	p	-p	p	p	p	p
	3	0	0	0	0	-p	-p	-p	-p
10-6	1	q	-q	-q	q	-p	-p	-p	-p
	2	q	-q	q	-q	q	q	q	q
	3	p	p	-p	-p	q	q	q	q
10-7	1	q	q	q	q	p	-p	-p	p
	2	q	q	q	q	-q	q	-q	q
	3	p	p	p	p	-q	-q	q	q
10-8	1	-p	-p	-p	-p	0	0	0	0
	2	p	p	p	p	-p	p	-p	p
	3	0	0	0	0	p	p	p	p
10-9	1	r	-r	r	-r	p	p	-p	-p
	2	q	q	-q	-q	p	-p	p	-p
	3	r	-r	-r	r	-q	-q	q	q
10-10	1	p	-p	-p	p	-q	q	-q	q
	2	q	q	-q	-q	r	-r	-r	r
	3	p	p	p	p	-q	-q	q	q
11-1	1	p	p	p	p	p	p	p	
11-4	1	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p
11-5	1	kp	kp	kp	kp	0	0	0	0
11-6	1	-kp	-kp	-kp	-kp	0	0	0	0
11-7	1	q	q	-q	-q	p	p	-p	-p
11-8	1	0	0	0	0	-p	-p	p	p
11-9	1	0	0	0	0	p	p	-p	-p
11-10	1	q	q	-q	-q	-p	-p	p	p

HP	k _i	96k							
		17	18	19	20	21	22	23	24
8-1	1	-r	-Q	-Q	-r	Q	r	r	Q
	2	Q	r	r	Q	-r	-Q	-Q	-r
	3	p	-p	p	-p	-r	-Q	-r	-Q
	4	p	-p	p	-p	Q	r	Q	r
	5	Q	Q	r	r	p	p	-p	-p
	6	-r	-r	-Q	-Q	p	p	-p	-p
8-2	1	r	Q	Q	r	-Q	-r	-r	-Q
	2	-Q	-r	-r	-Q	r	Q	Q	r
	3	-p	p	-p	p	r	Q	r	Q
	4	-p	p	-p	p	-Q	-r	-Q	-r
	5	-Q	-Q	-r	-r	-p	-p	p	p
	6	r	r	Q	Q	-p	-p	p	p
8-3	1	-r	-Q	-Q	-r	-Q	-r	-r	-Q
	2	Q	r	r	Q	r	Q	Q	r
	3	-p	-p	-p	-p	-r	-Q	-r	-Q
	4	p	p	p	p	Q	r	Q	r
	5	-Q	-Q	-r	-r	-p	-p	-p	-p
	6	r	r	Q	Q	p	p	p	p
8-4	1	r	Q	Q	r	Q	r	r	Q
	2	-Q	-r	-r	-Q	-r	-Q	-Q	-r
	3	p	p	p	p	r	Q	r	Q
	4	-p	-p	-p	-p	-Q	-r	-Q	-r
	5	Q	Q	r	r	p	p	p	p
	6	-r	-r	-Q	-Q	-p	-p	-p	-p
8-5	1	s	R	-R	-s	-u	-T	-s	u
	2	T	-u	u	-T	-R	s	-s	R
	3	-R	-s	s	R	T	u	-u	-T
	4	u	-T	T	-u	-s	R	-R	s
	5	Q	-p	-Q	p	s	-R	-s	R
	6	-p	-Q	p	Q	T	u	-T	-u
9-1	1	p	-p	-p	p	-q	q	-q	q
	2	q	q	-q	-q	p	p	-p	-p
	3	-r	r	-r	r	q	q	q	q
	4	q	-r	q	-q	p	q	q	p
	5	0	p	0	-p	0	0	-p	p
	6	p	0	-p	0	0	0	p	-p
9-2	1	0	0	0	0	p	p	-p	-p
	2	p	0	-p	0	0	0	0	0
	3	0	-p	0	p	-p	p	0	0
	4	-p	0	p	0	p	-p	0	0
9-3	1	0	-p	0	p	0	0	p	-p
	2	-p	0	p	0	0	0	-p	p
	3	0	p	0	-p	p	-p	0	0
	4	p	0	-p	0	-p	p	0	0

9-4	1	-p	-q	r	-q	-p	r	-q	-q
	2	-q	-p	-q	r	r	-p	-q	-q
	3	r	-q	-p	-q	-q	-q	-p	r
	4	-q	r	-q	-p	-q	-q	r	-p
9-5	1	-p	-q+2s	r	-q-s	-p	r	-q+2s	-q-s
		-kp	-kq	kr	-kq+ks	kp	-kr	kq	kq-ks
	2	-q+2s	-p	-q-s	r	r	-p	-q-s	-q+2s
		-kq	-kp	-kq+ks	kr	-kr	kp	kq-ks	kq
9-6	1	-q-s	r	-q+2s	-p	-q-s	-q+2s	r	-p
		-kq+ks	kr	-kq	-kp	kq-ks	kq	-kr	kp
	2	-p-2r	-kq	p-r	ks	-ks	kq	-p+r	p+2r
		-kp	q	kp+kr	-s	-s	q	kp+kr	-kp
10-1	1	-q	-q	-q	-q	-q	-q	-q	-q
	2	p	p	p	p	-q	-q	-q	-q
	3	-q	-q	-q	-q	p	p	p	p
	4	p	p	p	p	-p	-p	-p	-p
10-2	1	0	0	0	0	p	p	p	p
	2	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	-p	-p	-p	-p	0	0	0	0
10-3	1	-p	p	p	-p	p	-p	-p	p
	2	0	0	0	0	-p	p	-p	p
	3	p	p	p	-p	0	0	0	0
10-4	1	q	-q	-q	q	q	-q	-q	q
	2	-p	p	-p	p	q	-q	q	-q
	3	q	q	-q	-q	-p	-p	p	p
10-5	1	-p	-p	-p	-p	p	p	p	p
	2	0	0	0	0	-p	-p	-p	-p
	3	p	p	p	p	0	0	0	0
10-6	1	q	q	q	q	q	q	q	q
	2	-p	-p	-p	-p	q	q	q	q
	3	q	q	q	q	-p	-p	-p	-p
10-7	1	-q	q	q	-q	-q	q	q	-q
	2	p	-p	p	-p	-q	q	-q	q
	3	-q	-q	q	q	p	p	-p	-p
10-8	1	p	-p	-p	p	-p	p	p	-p
	2	0	0	0	0	p	-p	p	-p
	3	-p	-p	p	p	0	0	0	0
10-9	1	-q	-q	q	q	-r	-r	r	r
		-r	r	-r	r	-q	q	-q	q
	2	p	-p	-p	p	-q	q	q	-q
10-10	1	q	q	-q	-q	r	r	-r	-r
		-r	r	-r	r	-q	q	-q	q
	2	p	-p	-p	p	-q	q	q	-q
10-10	1	q	q	-q	-q	r	r	-r	-r
		-r	r	-r	r	-q	q	-q	q
	2	p	-p	-p	p	-q	q	q	-q

	2	-r	r	-r	r	-q	q	-q	q
		-p	p	p	-p	q	-q	-q	q
		p	p	-p	-p	-r	-r	r	r
	3	r	-r	r	-r	-p	p	-p	p
		-q	q	q	-q	p	-p	-p	p
		q	-q	-q	q	-p	p	p	p
11-1	1	p	p	p	p	p	p	p	
11-4	1	-p	-p	-p	-p	-p	-p	-p	
11-5	1	-p	-p	-p	-p	-p	-p	-p	
11-6	1	-kp	-kp	-kp	-kp	kp	kp	kp	kp
		p	p	p	p	p	p	p	p
11-7	1	p	p	-p	-p	q	q	-q	-q
		q	-q	q	-q	p	-p	p	-p
11-8	1	p	p	-p	-p	0	0	0	0
		0	0	0	0	-p	p	-p	p
		-p	p	p	-p	p	-p	-p	p
11-9	1	-p	-p	p	p	0	0	0	0
		0	0	0	0	p	-p	p	-p
11-10	1	p	-p	-p	p	-p	p	p	-p
		-q	q	-q	q	-p	p	-p	p
		-p	p	p	-p	p	p	p	-p

5. ЛИТЕРАТУРА

- Александров К.С., Безносиков Б.В. Перовскитоподобные кристаллы (иерархия структур, многообразие физических свойств, возможности синтеза новых соединений)// Новосибирск: Наука. Сиб. предприятие РАН. 1997. С.216.
- Александров К.С., Безносиков Б.В. Перовскиты. Настоящее и будущее. (Многообразие прафаз, фазовые превращения, возможности синтеза новых соединений)// Новосибирск: Издательство СО РАН. 2004. С.231.
- Мельникова С.В., Мисюль С.В., Бовина А.Ф., Афанасьев М.Л. Оптические и рентгеновские исследования симметрии искаженных фаз кристалла $(\text{NH}_4)_2\text{KGaF}_6$ //ФТТ, 2002, Т.44, В.10, С.1876-1880.
- Флеров И.Н., Горев М.В., Фокина В.Д., Бовина А.Ф., Молокеев М.С., Бойко Ю.В., Воронов В.Н., Кочарова А.Г. Структурный фазовый переход в эльпасолите $(\text{NH}_4)_2\text{KWO}_3\text{F}_3$ //ФТТ, 2006, Т.48, В.1, С.99-105.

5. Горев М.В., Флеров И.Н., Трессо А., Деню Д., Зайцев А.И., Фокина В.Д. Исследование фазовых диаграмм аммонийных криолитов $(\text{NH}_4)_3\text{Ga}_{1-x}\text{Sc}_x\text{F}_6$ //ФТТ, 2002, Т.44, В.10, С.1864-1869.
6. Мельникова С.В., Мисюль С.В., Бовина А.Ф., Афанасьев М.Л. Оптические и рентгеновские исследования структурного фазового перехода в криолите $(\text{NH}_4)_3\text{GaF}_6$ //ФТТ, 2001, Т.43, В.8, С.1533-1535.
7. Флеров И.Н., Горев М.В., Фокина В.Д., Бовина А.Ф., Лапаш Н.М. Калометрические и рентгеновские исследования перовскитоподобных оксифторидов $(\text{NH}_4)_3\text{WO}_3\text{F}_3$ и $(\text{NH}_4)_3\text{TiOF}_5$ //ФТТ, 2004 Т.46, В.5, С.888-894.
8. Александров К.С., Мисюль С.В. Фазовые переходы, связанные с ротационными искажениями структуры в кристаллах, родственных перовскиту//Кристаллография, 1981, Т.26, В.5, С.1074-1085.
9. Зиненко В.И., Мисюль С.В. Возможные фазовые переходы в кристаллах с пространственной группой O_h^2 // Деп. в ВИНТИ 01.11.77. №313-78.1978. С.12.
10. Stokes Y.T., Hatch D.M. Isotropy subgroups of the 230 crystallographic spacegroups// London: Wold Scientific Publishing. 1988. P.580.
11. Мисюль С.В. Симметричный анализ решеточных колебаний и искаженные фазы в структуре эльпасолита $\text{A}_2\text{BB}'\text{X}_6$ // Кристаллография, 1984, Т.29, В.5, С.941-944.
12. Гуфан Ю.М., Дмитриев В.П., Рошаль С.Б., Снежков В.И. Фазы Ландау в плотноупакованных структурах//Ростов-на-Дону: Изд-во Ростовского университета. 1990. С.256.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч.1//М: Наука. Главная редакция физико-математической литературы. 1976, 584.
14. В.П.Сахненко, В.М.Таланов, Г.М.Чечин. Теоретико-групповой анализ полного конденсата, возникающего при структурных фазовых переходах //Физика металлов и металловедение, 1986, Т.62, В.5, С.847-856.
15. Лифшиц Е.М. К теории фазовых переходов второго рода. Изменение элементарной ячейки кристалла при фазовых переходах второго рода//ЖЭТФ, 1941, Т.11, В.2, С.255-268.
16. Изюмов Ю.А., Найш В.Е., Сыромятников В.Н. Симметричный анализ структурных переходов в соединениях La_3S_4 и La_3Se_4 // Кристаллография, 1977, Т.24, В.6, С.1115-1121.

17. Dimmock J. The theory of second order phase transition//Phys.Rev., 1963, V.130, No.4, P.1337-1344.
18. Иванова Т.И., Кесорецких В.Н., Сахненко В.П., Чечин Г.М. Теоретико-групповой анализ структуры низкосимметричных фаз, возникающих при фазовых переходах в кристаллах с пространственной группой O_h^1 // Деп. в ВИНТИ 09.06.86. №5263-86.1986. С.47.
19. Сахненко В.П., Таланов В.М., Чечин Г.М. Возможные фазовые переходы и атомные смещения в кристаллах с пространственной группой O_h^7 .1// Деп. в ВИНТИ 23.11.81.№638-82 Деп.1982. С.25.
20. Иванова Т.И., Мисюль С.В., Сахненко В.П., Чечин Г.М. Теоретико-групповой анализ структурных фазовых переходов в кристаллах с пространственной группой D_{4h}^1 . 1. Полный конденсат параметров порядка//Препринт института физики им. Л.В.Киренского СО РАН №628Ф, Красноярск, 1990, С.56.
21. Иванова Т.И., Сахненко В.П., Чечин Г.М., Мисюль С.В., Александров К.С. Теоретико-групповой анализ структурных фазовых переходов в кристаллах с пространственной группой D_{4h}^2 . 1. Полный конденсат параметров порядка// Препринт института физики им. Л.В.Киренского СО РАН №548Ф, Красноярск, 1989, С.60.
Aleksandrov K.S., Misyul S.V., Ivanova T.I., Sakhnenko V.P., Chechin G.M. Group-theoretical Analysis of Possible Structural Phase Transitions in The High-temperature Superconductors//Phase Transitions, 1990, V.22, No 2, P.245-255.
22. Батуринец Е.Е., Мисюль С.В. Теоретико-групповой анализ полного конденсата, при структурных фазовых переходах в кристаллах с пространственной группой O_h^2 //9-ый Международный симпозиум "Порядок, беспорядок и свойства оксидов". Труды симпозиума. Ч.1.- Ростов н/Д.:Изд-во РПГУ, 2006.-С.41-45.
23. Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов//М: Наука. Главная редакция физико-математической литературы. 1984. С.248.
24. Сахненко В.П., Таланов В.И., Чечин Г.М., Ульянова С.И. Возможные фазовые переходы и атомные смещения в кристаллах с пространственной группой O_h^2 .2. Анализ механического и перестановочного представлений//Деп. в ВИНТИ 30.11.83.№6379-83 Деп.1983. С.61.
25. Sakhnenko V.P., Chechin G.M. Symmetry Methods and Space Group Representations in the Theory of Phase Transitions//Compt.Math.Applic.,

- 1988, V.16, No5-8, P.453-464.
26. Ковалёв О.В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления Федоровских групп//М.: Наука.Гл.ред.физ.-мат.лит. 1986. С.368.
 27. Miller S.C., Love W.F. Tables of Irreducible Representations of The Space Groups and Co-Representations of Magnetic Space Groups // Colorado: Pruett Press Boulder, 1967, P.366.
 28. International Tables for Crystallography. Volume: Space-group Symmetry// Edited by Theo Hahn. Published by Kluwer Academic Publishers, 2002, P.911.

Ответственный за выпуск С.В.Мисюль

Подписано в печать 25.04.2007 Гарнитура "Arial"

Уч.изд.л. 3. Заказ № 28 Тираж 70 экз.

Отпечатано в типографии

Института физики им. Л.В.Киренского СО РАН

660036. Красноярск. Академгородок.