

272. Molekel-Eigenfunktionen bestimmter Symmetrie : Linearkombinationen von S-Funktionen

von Hs. H. Günthard, E. Heilbronner und B. Messikommer.

(27. VIII. 52.)

I. Einleitung.

Die Konstruktion der „richtigen Linearkombinationen“ von Eigenfunktionen nullter Näherung ist ein leistungsfähiges Hilfsmittel zur Faktorisierung der Säkularmatrix, wenn es sich um Molekeln gegebener Symmetrie handelt. Abgesehen davon, dass die numerische Behandlung solcher Probleme durch die Reduktion auf irreduzible Bestandteile ganz wesentlich vereinfacht wird, gewinnt man so eine Übersicht über die Symmetriespezies der zu jedem Eigenwert gehörigen Eigenfunktionen.

Dabei können die zu einer bestimmten irreduziblen Darstellung der Symmetriegruppe des Systems¹⁾ gehörigen Bestandteile unabhängig von denjenigen Bestandteilen berechnet werden, die zu anderen irreduziblen Darstellungen gehören. Man erhält alle Eigenwerte erster Näherung, die zu Eigenfunktionen gleicher Symmetriespezies gehören, indem man die so erhaltenen Bestandteile diagonalisiert.

Das Verfahren zur Konstruktion der Eigenfunktionen bestimmter Symmetrie hängt allein von den allgemeinen Gesetzen der Gruppentheorie und der Quantenmechanik²⁾ ab. Vor allem ist es von der Art des gewählten Näherungsverfahrens unabhängig.

II. Methode.

Im folgenden soll unter der Gruppe \mathcal{G} immer die abstrakte Gruppe der Ordnung g verstanden werden. Die linearen Transformationen der Symmetriegruppe des *Hamilton-Operators* H_{op} , die mit \mathcal{G} holodrisch isomorph ist, bezeichnen wir mit T . Den Deckoperationen sei das Symbol T_{op} zugeordnet. Unterwirft man eine Eigenfunktion u des *Hamilton-Operators* H_{op} der Deckoperation T_{op} , so ist ihr nach der folgenden Definitionsgleichung (1) eine neue Eigenfunktion von H_{op} zugeordnet:

$$T_{op}u(q) = u(T^{-1}q). \quad (1)$$

In dieser Gleichung soll q sämtliche Koordinaten bedeuten.

¹⁾ Genauer: des *Hamilton-Operators* des Systems.

²⁾ Vgl. *E. Wigner*, Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Theorie der Atompektren. *W. Pauli*, Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik. Handbuch der Physik, Bd. 24, II, 133.

Gehört eine Eigenfunktion $u_1^{(i)}(q)$ zur irreduziblen Darstellung $\Gamma^{(i)}$ des Grades l_i der Gruppe \mathfrak{G} , so besteht die Gleichung:

$$T_{\text{op}} u_1^{(i)}(q) = \sum_k^{l_i} u_k^{(i)}(q) \Gamma_{kl}^{(i)}(T). \quad (2)$$

Hierin bedeuten die $\Gamma_{kl}^{(i)}$ die Koeffizienten, mit denen die Eigenfunktionen $u_k^{(i)}(q)$ zu versehen sind, damit ihre Linearkombination die Funktion $T_{\text{op}} u_1^{(i)}(q)$ ergibt. Dies ist nur ein Spezialfall des allgemeinen Satzes, nach welchem sich jede Funktion $T_{\text{op}} u(q)$ als Linear-Kombination eines vollständigen Systems von Eigenfunktionen $u_k(q)$ darstellen lassen muss.

Fasst man die Zeilenmatrix aller zur Darstellung $\Gamma^{(i)}$ gehörigen Eigenfunktionen $u_k^{(i)}(q)$, nämlich $u_1^{(i)}(q)$, $u_2^{(i)}(q)$, $u_3^{(i)}(q)$, ... $u_{l_i}^{(i)}(q)$ als Basis auf, so lässt sich die der Gleichung (2) analoge Gleichung (2') schreiben:

$$T_{\text{op}} \left\{ \overline{u^{(i)}(q)} \right\} = \left\{ \overline{u^{(i)}(q)} \right\} \Gamma^{(i)}(T) \quad (2')$$

$\Gamma^{(i)}$ bedeutet hier die Matrix $(\Gamma_{kl}^{(i)})$.

Man kann auch, ausgehend von der Gleichung (1), mit Hilfe beliebiger Funktionen $F(q)$, auf die sich die linearen Transformationen der zu \mathfrak{G} holodrisch isomorphen Substitutionsgruppe anwenden lassen, Darstellungen der Gruppe \mathfrak{G} erzeugen. Diese können reduzibel oder irreduzibel sein.

Entnehmen wir dem Satz von Funktionen F , der durch die Gleichung

$$T_{\text{op}} F(q) = F(T^{-1}q)$$

definiert wird, wenn T alle Transformationen der Gruppe durchläuft, h linear unabhängige Funktionen $F_1(q)$, $F_2(q)$, $F_3(q)$, ... $F_h(q)$ ($h \leq g$), so bildet dieser Satz die Basis für eine Darstellung von \mathfrak{G} .

$$T_{\text{op}} \{F_1, F_2, F_3, \dots, F_h\} = \{F_1, F_2, F_3, \dots, F_h\} \Gamma(T).$$

Diese Tatsache kann man benützen, um Linearkombinationen von Eigenfunktionen bestimmter Symmetrie herzustellen. Wir gehen dabei von Atom-Einelektronen-Eigenfunktionen (AO) aus und bilden aus diesen durch Linearkombination Molekel-Einelektronen-Eigenfunktionen nullter Näherung (MO) (LCAO-Verfahren)¹⁾.

Dazu wollen wir noch die folgenden Voraussetzungen machen:

1. Das System der Gleichgewichtslagen der Atomkerne besitze eine Punktsymmetriegruppe, die mit der abstrakten Gruppe \mathfrak{G} holodrisch isomorph sei.

2. Die irreduziblen Darstellungen $\Gamma^{(i)}$ der Gruppe \mathfrak{G} sollen immer in unitärer Gestalt angenommen werden.

3. Als AO sollen in der vorliegenden Arbeit nur Eigenfunktionen von S-Zuständen berücksichtigt werden.

¹⁾ Der *Hamilton-Operator* ist in diesem Fall derjenige eines Einzelektrons im Felde der Kerne und der übrigen Elektronen (d. i. im selfconsistent field).

4. Die erste Zeile der Gruppentafel der Gruppe \mathfrak{G} soll die Basis für die reguläre Darstellung der Gruppe bilden. Damit ist auch gleichzeitig eine Reihenfolge der Elemente festgelegt, die für alle folgenden Betrachtungen bindend sein soll.

5. Die Molekeln betrachten wir als aus Sätzen äquivalenter Atome zusammengesetzt. Die Numerierung der Atome innerhalb eines Satzes äquivalenter Teilchen allgemeiner Lage ist dann ebenfalls durch die erste Zeile der Gruppentafel festgelegt, wenn wir folgende Abmachung treffen: Wir belegen ein beliebiges Atom des Satzes mit der Nummer 1. Dann führe die dem Element G_k der ersten Zeile der Gruppentafel von \mathfrak{G} zugeordnete Symmetrieeoperation $T_{op}(G_k)$ dieses Teilchen 1 in das Teilchen k über.

6. Enthält die Molekel neben Atomen in allgemeiner Lage auch noch solche in spezieller Lage, so sind für diese die „richtigen Linear-kombinationen“ mittels einfacher, weiter unten angegebener Regeln aus denen für Atome in allgemeiner Lage leicht abzuleiten.

7. Gemäss den Sätzen der Darstellungstheorie sind die zu nicht äquivalenten irreduziblen Darstellungen gehörigen MO zueinander hermitisch orthogonal. Sie brauchen aber nicht normiert zu sein, auch dann nicht, wenn sie aus normierten AO zusammengesetzt wurden. Diejenigen MO, die zu Darstellungen zweiten und höheren Grades gehören, werden als zu den verschiedenen Kolonnen gehörige MO angenommen.

Besteht eine Molekel aus mehreren Sätzen von Atomen in allgemeiner Lage, so beschränkt sich die Berechnung der Elemente der Säkulargleichung auf folgende Schritte:

a) Ist $\Gamma^{(i)}$ eine irreduzible Darstellung ersten Grades von \mathfrak{G} , und sind $\varphi_I^{(i)}$, $\varphi_{II}^{(i)}$, $\varphi_{III}^{(i)}$, ... die von den verschiedenen Sätzen I, II, III, ... von Atomen herrührenden und zu $\Gamma^{(i)}$ gehörigen MO, so sind die Elemente der Gleichung

$$|H_{kl}^{(i)} - E^{(i)} S_{kl}^{(i)}| = 0$$

gegeben durch:

$$H_{I,II}^{(i)} = \int \varphi_I^{(i)*} H_{op} \varphi_{II}^{(i)} d\tau,$$

$$S_{I,II}^{(i)} = \int \varphi_I^{(i)*} \varphi_{II}^{(i)} d\tau.$$

b) Ist $\Gamma^{(i)}$ eine irreduzible Darstellung vom Grade l_i und gehören die MO

$$\varphi_{I,1}^{(i)}, \varphi_{I,2}^{(i)}, \varphi_{I,3}^{(i)}, \dots, \varphi_{I,l_i}^{(i)} \quad \text{zum Satz I,}$$

$$\varphi_{II,1}^{(i)}, \varphi_{II,2}^{(i)}, \varphi_{II,3}^{(i)}, \dots, \varphi_{II,l_i}^{(i)} \quad \text{zum Satz II usw.,}$$

so genügt es, die Säkulargleichung nur aus denjenigen MO zu bilden, die zur gleichen Zeile der Darstellung $\Gamma^{(i)}$ gehören. Die Säkular-

gleichungen aus den MO zur zweiten, dritten und weitem Zeile ergeben dann die gleichen Eigenwerte.

8. Liegt in der Molekel ein Satz von Atomen in spezieller Lage vor, so sind diejenigen irreduziblen Darstellungen und Linearkombinationen zu verwenden, die gleichzeitig zu der niedrigsten durch die spezielle Lage definierten Untergruppe von \mathfrak{G} gehören. Die Nummerierung der Teilchen eines solchen Satzes folge der Nummerierung der Gruppenelemente der ersten Zeile der Gruppentafel, so wie es weiter oben festgelegt wurde.

Unter diesen Voraussetzungen lassen sich die zu den irreduziblen Darstellungen der Gruppe \mathfrak{G} gehörigen MO als Linearkombinationen von AO in der folgenden Weise angeben:

Unter dem Einfluss von Deckoperationen G_{op} der zu \mathfrak{G} isomorphen Symmetriegruppe der Molekel erzeugen die g zu einem Satz äquivalenter Atome gehörigen AO $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_g$ gerade eine reguläre Darstellung von \mathfrak{G} :

$$G_{op}(\chi_1 \chi_2 \dots \chi_g) = (\chi_1 \chi_2 \dots \chi_g) \Gamma(G). \quad (3)$$

Nach einem allgemeinen Satz der Darstellungstheorie¹⁾ lässt sich die reguläre Darstellung Γ mit der Matrix N reduzieren, wenn N aus den normierten Stellenzeilen eines vollständigen Systems aller irreduziblen Darstellungen $\Gamma^{(i)}$ von \mathfrak{G} gebildet wird. In dem vollständigen System der irreduziblen Darstellungen tritt jede Darstellung $\Gamma^{(i)}$ so oft auf, als ihr Grad l_i angibt²⁾.

Setzt man

$$(\varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_g) = (\chi_1 \chi_2 \dots \chi_g) N$$

für die neuen zu den irreduziblen Darstellungen von \mathfrak{G} gehörigen MO an, so ergibt die Gleichung (3)³⁾:

$$G_{op}\{\tilde{\varphi}\} = \{\tilde{\varphi}\} N^\dagger \Gamma(G) N.$$

Dabei sind die Zeilen und Kolonnen von Γ nach den Gruppenelementen benannt. Auch die Zeilen von N tragen diese Namen, während die Kolonnen nach den Stellenzeilen eines vollständigen Systems irreduzibler Darstellungen von \mathfrak{G} geordnet sind.

Somit haben wir bei Kenntnis der Matrix N gemäss der Formel

$$\{\tilde{\varphi}\} = \{\tilde{\chi}\} N$$

die zu den irreduziblen Darstellungen von \mathfrak{G} gehörigen MO. Die Koeffizienten der gesuchten Linearkombinationen der χ stehen in den Kolonnen von N .

¹⁾ A. Speiser, Theorie der Gruppen endlicher Ordnung, Berlin 1937, Seite 164.

²⁾ Ibid., Seite 153.

³⁾ \tilde{A} bedeute die zu A transponierte, A^\dagger die adjungierte Matrix.

Tabelle I.
Zusammenstellung der behandelten Gruppen

Nr.	Abstrakte Gruppe		Holomorphe Punktgruppe
	Name	Symbol	
1	Zyklische Gruppen	\mathcal{C}_1	C_1
2		\mathcal{C}_2	C_2, C_1, C_s
3		\mathcal{C}_3	C_3
4		\mathcal{C}_4	C_4, S_4
5		\mathcal{C}_5	C_5
6		\mathcal{C}_6	C_6
7		\mathcal{C}_7	C_7
8	Diedergruppen	\mathcal{D}_3	D_3, C_{3v}
9		\mathcal{D}_4	D_4, C_{4v}, D_{2d}
10		\mathcal{D}_5	D_5, C_{5v}
11		\mathcal{D}_6	D_6, C_{6v}
12		\mathcal{D}_7	D_7, C_{7v}
13	Vierergruppe	\mathcal{B}	D_2, C_{2v}, C_{2h}
14	Alternierende Gruppe	\mathcal{A}_4	T
15	Symmetrische Gruppe	\mathcal{S}_4	T_d, O

Tabelle II.
Zusammenstellung der Gruppen, die sich aus den Gruppen der Tab. I und der Zweiergruppe ableiten lassen.

Nr.	Abstrakte Gruppen	Holomorphe Punktgruppen	
	Zusammensetzung	$\mathcal{C}_2 = C_1$	$\mathcal{C}_2 = C_s^1)$
3	$\mathcal{C}_3 \times \mathcal{C}_2$	C_{3i}	C_{3h}
4	$\mathcal{C}_4 \times \mathcal{C}_2$	C_{4h}	C_{4h}
5	$\mathcal{C}_5 \times \mathcal{C}_2$	C_{5i}	C_{5h}
6	$\mathcal{C}_6 \times \mathcal{C}_2$	C_{6h}	C_{6h}
7	$\mathcal{C}_7 \times \mathcal{C}_2$	C_{7i}	C_{7h}
8	$\mathcal{D}_3 \times \mathcal{C}_2$	D_{3d}	D_{3h}
9	$\mathcal{D}_4 \times \mathcal{C}_2$	D_{4h}	D_{4h}
10	$\mathcal{D}_5 \times \mathcal{C}_2$	D_{5d}	D_{5h}
11	$\mathcal{D}_6 \times \mathcal{C}_2$	D_{6h}	D_{6h}
12	$\mathcal{D}_7 \times \mathcal{C}_2$	D_{7d}	D_{7h}
13	$\mathcal{B} \times \mathcal{C}_2$ ²⁾	D_{2h}	D_{2h}
14	$\mathcal{A}_4 \times \mathcal{C}_2$	T_h	T_h
15	$\mathcal{S}_4 \times \mathcal{C}_2$	O_h	O_h

1) C_s bedeute hier durchwegs die Spiegelungsgruppe mit horizontaler Spiegelebene.

2) \mathcal{B} realisiert durch D_2, C_{2v} .

Die Berechnung der Matrix N wurde für die in der Tabelle I angegebenen Gruppen durchgeführt.

Alle irreduziblen Darstellungen sind in unitärer Gestalt angenommen. Gruppen, die sich als Produkt einer der obigen Gruppen und der Zweiergruppe \mathbb{C}_2 darstellen lassen, wurden nicht explizite aufgenommen. In diesem Fall lassen sich nämlich die irreduziblen Darstellungen als direktes Produkt der irreduziblen Darstellungen der beiden Faktoren \mathbb{G} und \mathbb{C}_2 bilden, vorausgesetzt dass sämtliche Elemente beider Faktoren vertauschbar sind. (Vergleiche Tab. II.)

Für die erste Zeile des direkten Produktes $\mathbb{C}_2 \times \mathbb{G}$ sei diejenige Reihenfolge der Elemente gewählt, die aus der rechtsseitigen Zerlegung

$$\mathbb{C}_2 \times \mathbb{G} = \mathbb{G} \cdot E + \mathbb{G} \cdot C \quad (E, C \in \mathbb{C}_2)$$

hervorgeht.

Tabelle III.

$$N_{\mathbb{C}_1}$$

\mathbb{C}_1		$\Gamma^{(1)}$
	C_1	A
E	E	1

Tabelle IV.

$N_{\mathbb{C}_2}$

\mathbb{C}_2		$\Gamma^{(1)}$	$\Gamma^{(2)}$	
	C_2	A	B	
	C_1	A_g	A_u	
	C_8	A'	A''	
E	E	1	1	
A	$C_2(z)$ Z	σ_h	1 -1	$\frac{1}{\sqrt{2}}$

Tabelle V.

$N_{\mathbb{C}_3} \quad \varepsilon = \exp\left(\frac{2\pi i}{3}\right)$

\mathbb{C}_3		$\Gamma^{(1)}$	$\Gamma^{(2)}$	$\Gamma^{(3)}$	
	C_3	A	E		
E	E	1	1	1	
A	C_3	1	ε	ε^2	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
A^2	C_3^{-1}	1	ε^2	ε	

Tabelle VI.

$N_{\mathbb{C}_4}$

\mathbb{C}_4		$\Gamma^{(1)}$	$\Gamma^{(2)}$	$\Gamma^{(3)}$	$\Gamma^{(4)}$	
	C_4	A	B	E		
	S_4	A	B	E		
E	E	1	1	1	1	
A	C_4	1	-1	i	-i	
A^2	C_2	1	-1	-1	-1	
A^3	C_4^{-1}	1	1	-i	i	$\frac{1}{\sqrt{4}}$

Tabelle VII.

$N_{\mathbb{C}_5} \quad \varepsilon = \exp\left(\frac{2\pi i}{5}\right)$

\mathbb{C}_5		$\Gamma^{(1)}$	$\Gamma^{(2)}$	$\Gamma^{(3)}$	$\Gamma^{(4)}$	$\Gamma^{(5)}$	
	C_5	A	E_1		E_2		
E	E	1	1	1	1	1	
A	C_5	1	ε	ε^4	ε^2	ε^3	
A^2	C_5^2	1	ε^2	ε^3	ε^4	ε	$\frac{1}{\sqrt{5}}$
A^3	C_5^{-2}	1	ε^3	ε^2	ε	ε^4	
A^4	C_5^{-1}	1	ε^4	ε	ε^3	ε^2	

Tabelle VIII.

$$N_{C_6} \quad \varepsilon = \exp\left(\frac{2\pi i}{6}\right)$$

C ₆			Γ ⁽¹⁾	Γ ⁽²⁾	Γ ⁽³⁾	Γ ⁽⁴⁾	Γ ⁽⁵⁾	Γ ⁽⁶⁾
	C ₆	S ₆	A	B	E ₁	E ₂	E _{2g}	E _{2g}
			A _g	B _u	E _{1u}		E _{2g}	
E	E	E	1	1	1	1	1	1
A	C ₆	S ₆	1	-1	ε	ε ⁵	ε ²	ε ⁴
A ²	C ₃	C ₃	1	1	ε ²	ε ⁴	ε ⁴	ε ²
A ³	C ₂	Z	1	-1	-1	-1	1	1
A ⁴	C ₃ ⁻¹	C ₃ ⁻¹	1	1	ε ⁴	ε ²	ε ²	ε ⁴
A ⁵	C ₆ ⁻¹	S ₆ ⁻¹	1	-1	ε ⁵	ε	ε ⁴	ε ²

$\frac{1}{\sqrt{6}}$

Tabelle IX.

$$N_{C_7} \quad \varepsilon = \exp\left(\frac{2\pi i}{7}\right)$$

C ₇			Γ ⁽¹⁾	Γ ⁽²⁾	Γ ⁽³⁾	Γ ⁽⁴⁾	Γ ⁽⁵⁾	Γ ⁽⁶⁾	Γ ⁽⁷⁾
	C ₇		A	E ₁		E ₂		E ₃	
E	E		1	1	1	1	1	1	1
A	C ₇		1	ε	ε ⁶	ε ²	ε ⁵	ε ³	ε ⁴
A ²	C ₇ ²		1	ε ²	ε ⁵	ε ⁴	ε ³	ε ⁶	ε
A ³	C ₇ ³		1	ε ³	ε ⁴	ε ⁶	ε	ε ²	ε ⁵
A ⁴	C ₇ ⁻³		1	ε ⁴	ε ³	ε	ε ⁶	ε ⁵	ε ²
A ⁵	C ₇ ⁻²		1	ε ⁵	ε ²	ε ³	ε ⁴	ε	ε ⁶
A ⁶	C ₇ ⁻¹		1	ε ⁶	ε	ε ⁵	ε ²	ε ⁴	ε ³

$\frac{1}{\sqrt{7}}$

Tabelle X.

$$N_{D_3} \quad \varepsilon = \exp\left(\frac{2\pi i}{3}\right)$$

	D ₃			Γ ⁽¹⁾	Γ ⁽²⁾	Γ ₁₁ ⁽³⁾	Γ ₁₂ ⁽³⁾	Γ ₂₁ ⁽³⁾	Γ ₂₂ ⁽³⁾
		D ₃	C _{3v}	A ₁	A ₂	E			
				A ₁	A ₂	E			
1	E	E	E	1/√2	1/√2	1	0	0	1
2	A	C ₃ (z)	C ₃ (z)	1/√2	1/√2	ε	0	0	ε ²
2	A ²	C ₃ ⁻¹ (z)	C ₃ ⁻¹ (z)	1/√2	1/√2	ε ²	0	0	ε
3	C	C ₂ (1)	σ _v (1)	1/√2	-1/√2	0	1	1	0
3	AC	C ₂ (3)	σ _v (3)	1/√2	-1/√2	0	ε	ε ²	0
3	A ² C	C ₂ (2)	σ _v (2)	1/√2	-1/√2	0	ε ²	ε	0

$\frac{1}{\sqrt{3}}$

Tabelle XI.

$$N_{\mathcal{D}_4} \quad \varepsilon = \exp\left(\frac{2\pi i}{4}\right)$$

\mathcal{D}_4					$\Gamma^{(1)}$	$\Gamma^{(2)}$	$\Gamma^{(3)}$	$\Gamma^{(4)}$	$\Gamma_{11}^{(5)}$	$\Gamma_{12}^{(5)}$	$\Gamma_{21}^{(5)}$	$\Gamma_{22}^{(5)}$
		D_4			A_1	A_2	B_1	B_2			E	
			C_{4v}		A_1	A_2	B_1	B_2			E	
				D_{2d}	A_1	A_2	B_1	B_2			E	
1	E	E	E	E	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	1	0	0	1
2	A	$C_4(z)$	$C_4(z)$	$S_4(z)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	i	0	0	-i
3	A^2	$C_2(z)$	$C_2(z)$	$C_2(z)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	-1	0	0	-1
2	A^3	$C_4^{-1}(z)$	$C_4^{-1}(z)$	$S_4^{-1}(z)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	-i	0	0	i
4	C	$C_2(y)$	$\sigma_v(y)$	$C_2(y)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	1	1	0
5	AC	$C_2(x, -y)$	$\sigma_d(x, -y)$	$\sigma_d(x, -y)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	i	-i	0
4	A^2C	$C_2(x)$	$\sigma_v(x)$	$C_2(x)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	-1	1	0
5	A^3C	$C_2(x, y)$	$\sigma_d(x, y)$	$\sigma_d(x, y)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	-i	i	0

 $\frac{1}{\sqrt{4}}$

Tabelle XII.

$$N_{\mathcal{D}_5} \quad \varepsilon = \exp\left(\frac{2\pi i}{5}\right)$$

\mathcal{D}_5					$\Gamma^{(1)}$	$\Gamma^{(2)}$	$\Gamma_{11}^{(3)}$	$\Gamma_{12}^{(3)}$	$\Gamma_{21}^{(3)}$	$\Gamma_{22}^{(3)}$	$\Gamma_{11}^{(4)}$	$\Gamma_{12}^{(4)}$	$\Gamma_{21}^{(4)}$	$\Gamma_{22}^{(4)}$
		D_5			A	B	E_1				E_2			
			C_{5v}		A_1	A_2	E_1				E_2			
1	E	E	E	E	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	1	0	0	1	1	0	0	1
2	A	$C_5(z)$	$C_5(z)$		$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε	0	0	ε^4	ε^2	0	0	ε^3
3	A^2	$C_5^2(z)$	$C_5^2(z)$		$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε^2	0	0	ε^3	ε^4	0	0	ε
3	A^3	$C_5^{-2}(z)$	$C_5^{-2}(z)$		$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε^3	0	0	ε^2	ε	0	0	ε^4
2	A^4	$C_5^{-1}(z)$	$C_5^{-1}(z)$		$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε^4	0	0	ε	ε^3	0	0	ε^2
4	C	$C_2(1)$	$\sigma_v(1)$		$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	1	1	0	0	1	1	0
4	AC	$C_2(4)$	$\sigma_v(4)$		$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	ε	ε^4	0	0	ε^2	ε^3	0
4	A^2C	$C_2(2)$	$\sigma_v(2)$		$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	ε^2	ε^3	0	0	ε^4	ε	0
4	A^3C	$C_2(5)$	$\sigma_v(5)$		$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	ε^3	ε^2	0	0	ε	ε^4	0
4	A^4C	$C_2(3)$	$\sigma_v(3)$		$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	ε^4	ε	0	0	ε^3	ε^2	0

 $\frac{1}{\sqrt{5}}$

Table XIII.

N_{D_6}

$$\varepsilon = \exp\left(\frac{2\pi i}{6}\right)$$

	\mathcal{D}_6	D_6	C_{6^v}	$\Gamma^{(1)}$		$\Gamma^{(2)}$		$\Gamma^{(3)}$		$\Gamma^{(4)}$		$\Gamma^{(5)}$		$\Gamma^{(6)}$					
				A_1	A_1	A_2	A_2	B_1	B_1	B_2	B_2	$I_{11}^{(5)}$	$I_{12}^{(5)}$	$I_{21}^{(5)}$	$I_{22}^{(5)}$	$I_{11}^{(6)}$	$I_{12}^{(6)}$	$I_{21}^{(6)}$	$I_{22}^{(6)}$
1	E	E	E	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	1	0	0	1	0	0	1	
2	A	$C_6(z)$	$C_6(z)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	ε	0	0	ε^4	ε^2	0	0	ε^4
3	A^2	$C_3(z)$	$C_3(z)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε^2	0	0	ε^4	ε^4	0	0	ε^2
4	A^3	$C_2(z)$	$C_2(z)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	-1	0	0	-1	1	0	0	1
3	A^4	$C_3^{-1}(z)$	$C_3^{-1}(z)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε^4	0	0	ε^2	ε^2	0	0	ε^4
2	A^5	$C_6^{-1}(z)$	$C_6^{-1}(z)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	ε^5	0	0	ε	ε^4	0	0	ε^2
5	C	$C_2(1)$	$\sigma_v(1)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	1	1	0	0	1	1	0
6	AC	$C_2(4)$	$\sigma_v(4)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	ε	ε^5	0	0	ε^2	ε^4	0
5	A^2C	$C_2(2)$	$\sigma_v(2)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	ε^2	ε^4	0	0	ε^4	ε^2	0
6	A^3C	$C_2(5)$	$\sigma_v(5)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	-1	-1	0	0	1	1	0
5	A^4C	$C_2(3)$	$\sigma_v(3)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	ε^4	ε^2	0	0	ε^2	ε^4	0
6	A^5C	$C_2(6)$	$\sigma_v(6)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	ε^5	ε	0	0	ε^4	ε^2	0

$\frac{1}{\sqrt{6}}$

$$\frac{1}{\sqrt{7}}$$

Tabelle XIV.

N_{D_7}

$$\varepsilon = \exp\left(\frac{2\pi i}{7}\right)$$

	\mathcal{D}_7	D_7	C_{7v}	$\Gamma^{(1)}$	$\Gamma^{(2)}$	$\Gamma^{(3)}$		$\Gamma^{(4)}$		$\Gamma^{(5)}$		
						$I_{11}^{(3)}$	$I_{21}^{(3)}$	$I_{11}^{(4)}$	$I_{12}^{(4)}$	$I_{21}^{(4)}$	$I_{22}^{(4)}$	
				A	B	E_1		E_2		E_3		
		C_{7v}		A_1	A_2	E_1	E_1	E_2	E_2	E_3	E_3	
1	E	E	E	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	1	0	1	1	0	0	1
2	A	$C_7(z)$	$C_7(z)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε	0	ε^6	ε^2	0	0	ε^4
3	A ²	$C_7^2(z)$	$C_7^2(z)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε^2	0	ε^5	ε^4	0	0	ε
4	A ³	$C_7^3(z)$	$C_7^3(z)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε^3	0	ε^4	ε^6	0	0	ε^5
4	A ⁴	$C_7^{-2}(z)$	$C_7^{-2}(z)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε^4	0	ε^3	ε	0	0	ε^2
3	A ⁵	$C_7^{-3}(z)$	$C_7^{-3}(z)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε^5	0	ε^2	ε^3	0	0	ε^6
2	A ⁶	$C_7^{-1}(z)$	$C_7^{-1}(z)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	ε^6	0	ε	ε^5	0	0	ε^3
5	C	$C_2(1)$	$\sigma_v(1)$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	1	0	0	1	1	0
5	AC	$C_2(5)$	$\sigma_v(5)$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	ε	ε^6	0	ε^2	ε^5	0
5	A ² C	$C_2(2)$	$\sigma_v(2)$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	ε^2	ε^5	0	ε^4	ε^3	0
5	A ³ C	$C_2(6)$	$\sigma_v(6)$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	ε^3	ε^4	0	ε^6	ε	0
5	A ⁴ C	$C_2(3)$	$\sigma_v(3)$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	ε^4	ε^3	0	ε	ε^6	0
5	A ⁵ C	$C_2(7)$	$\sigma_v(7)$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	ε^5	ε^2	0	ε^3	ε^4	0
5	A ⁶ C	$C_2(4)$	$\sigma_v(4)$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	ε^6	ε	0	ε^5	ε^2	0

Die zum Produkt $\mathbb{C}_2 \times \mathbb{C}$ gehörige Matrix N_x ist dann gegeben durch:

$$N_x = \begin{pmatrix} N & N \\ N & -N \end{pmatrix}.$$

Für die Bezeichnung der irreduziblen Darstellungen der behandelten Gruppen wurde die in der Spektroskopie übliche Bezeichnung verwendet¹⁾.

In den folgenden Tab. III bis XVII wurden isomorphe Punktsymmetriegruppen derselben Matrix N zugeordnet. Die Realisierung ihrer Elemente durch die Deckoperationen der kristallographischen und molekularen Punktsymmetriegruppen ist jedoch gesondert angegeben. Dadurch liess sich die Anzahl der wiederzugebenden Matrizen wesentlich verringern²⁾. Ferner gibt die erste Kolonne links des Rahmens jeder Matrix die Klassenzugehörigkeit der Gruppenelemente an; bei den abelschen Gruppen ist diese Angabe weggelassen, da dann jedes Element eine Klasse für sich bildet.

Zur Erleichterung des Gebrauchs der Tabellen ist zu jeder behandelten Punktsymmetriegruppe die stereographische Projektion angegeben worden. In dieser sind die Symmetrieelemente der Gruppe so bezeichnet, wie sie als Basis zur Herstellung ihrer regulären Darstellung verwendet wurden. Ausgehend von einem willkürlich gewählten Punkt 1 allgemeiner Lage sind sodann die Bilder dieses Punktes so numeriert, wie sie gemäss der in den Matrizen N festgelegten Reihenfolge der Gruppenelemente durch diese aus dem Punkt 1 erzeugt werden. Fallen Projektionen von Punkten übereinander, so bezieht sich die erste bzw. zweite Zahl auf den über bzw. unter der Projektionsebene liegenden Punkt.

Wir danken auch hier für die Unterstützung dieser Arbeit durch einen Arbeitsbeschaffungskredit des Bundes sowie durch die *Rockefeller Foundation (E. H.)*.

Tabelle XV.

$N_{\mathbb{C}}$

\mathbb{C}				$\Gamma^{(1)}$	$\Gamma^{(2)}$	$\Gamma^{(3)}$	$\Gamma^{(4)}$
	D_2			A	B_1	B_2	B_3
		C_{2v}		A_1	A_2	B_1	B_2
			C_{2h}	A_g	A_u	B_g	B_u
E	E	E	E	1	1	1	1
A	$C_2(z)$	$C_2(z)$	$C_2(z)$	1	1	-1	-1
B	$C_2(y)$	$\sigma_v(y)$	σ_h	1	-1	1	-1
AB	$C_2(x)$	$\sigma_v(x)$	Z	1	-1	-1	1

$\frac{1}{\sqrt{4}}$

¹⁾ G. Herzberg, *Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*, New York 1945.

²⁾ Dieselben Matrizen können auch für die Konstruktion von Valenzsymmetriekoordinaten Verwendung finden. Wir werden hierauf demnächst zurückkommen.

Tabelle XVI.

 $N_{\mathfrak{A}_4}$

$$\epsilon = \exp\left(\frac{2\pi i}{3}\right)$$

	\mathfrak{A}_4	T	$\Gamma^{(1)}$	$\Gamma^{(2)}$	$\Gamma^{(3)}$	F											
						$\Gamma_{11}^{(4)}$	$\Gamma_{12}^{(4)}$	$\Gamma_{13}^{(4)}$	$\Gamma_{21}^{(4)}$	$\Gamma_{22}^{(4)}$	$\Gamma_{23}^{(4)}$	$\Gamma_{31}^{(4)}$	$\Gamma_{32}^{(4)}$	$\Gamma_{33}^{(4)}$			
1	E	E	1	1	1	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	$1/\sqrt{3}$
2	A	$C_2(z)$	1	1	1	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$
2	B	$C_2(y)$	1	1	1	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$
2	AB	$C_2(x)$	1	1	1	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	$1/\sqrt{3}$
3	C	$C_3(1)$	1	ϵ	ϵ^2	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0
4	C^2	$C_3^{-1}(1)$	1	ϵ^2	ϵ	0	0	$1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$
3	AC	$C_3(3)$	1	ϵ	ϵ^2	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0
4	$(AC)^2$	$C_3^{-1}(3)$	1	ϵ^2	ϵ	0	0	$-1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	$1/\sqrt{3}$
3	BC	$C_3(2)$	1	ϵ	ϵ^2	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0
4	$(BO)^2$	$C_3^{-1}(2)$	1	ϵ^2	ϵ	0	0	$-1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$
3	ABC	$C_3(4)$	1	ϵ	ϵ^2	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0
4	$(ABO)^2$	$C_3^{-1}(4)$	1	ϵ^2	ϵ	0	0	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	$1/\sqrt{3}$

 $\frac{1}{\sqrt{12}}$

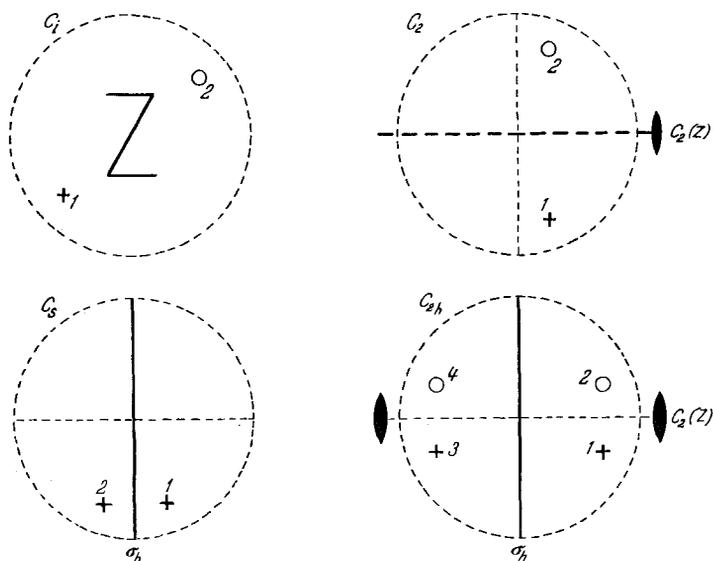


Fig. 1.
Zweier- und Vierergruppen.

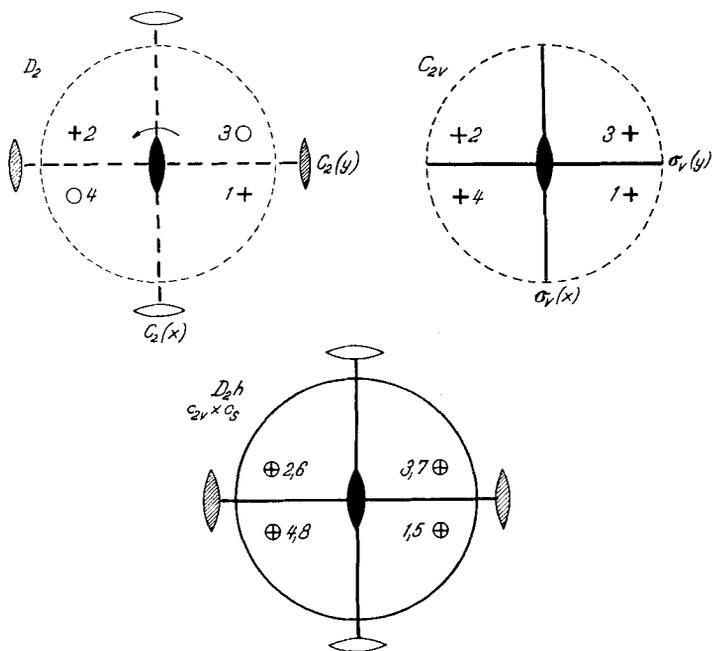


Fig. 2.
Orthorhombische Gruppen.

Tabelle XVII.

 $N_{\mathfrak{S}_4}$

\mathfrak{S}_4				$\Gamma^{(1)}$	$\Gamma^{(2)}$	$\Gamma_{11}^{(3)}$	$\Gamma_{12}^{(3)}$	$\Gamma_{21}^{(3)}$	$\Gamma_{22}^{(3)}$	$\Gamma_{11}^{(4)}$	$\Gamma_{12}^{(4)}$	$\Gamma_{13}^{(4)}$	$\Gamma_{21}^{(4)}$
		T_d		A_1	A_2	E				F_1			
		0		A_1	A_2	E				F_1			
1	E	E	E	1	-1	$1/\sqrt{2}$	0	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0
2	D	σ_1	$C_2(1)$	1	-1	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$
2	ABD	σ_2	$C_2(2)$	1	-1	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$
2	C^2D	σ_3	$C_2(3)$	1	-1	$-1/\sqrt{2}$	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0
2	DAC	σ_4	$C_2(4)$	1	-1	$-1/\sqrt{2}$	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	0	$1/\sqrt{3}$	0
2	CD	σ_5	$C_2(5)$	1	-1	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0
2	ACD	σ_6	$C_2(6)$	1	-1	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0
3	C	$C_3(1)$	$C_3(1)$	1	1	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0
3	C^2	$C_3^{-1}(1)$	$C_3^{-1}(1)$	1	1	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	0	$1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$
3	BC	$C_3(2)$	$C_3(2)$	1	1	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0
3	$(BC)^2$	$C_3^{-1}(2)$	$C_3^{-1}(2)$	1	1	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$
3	AC	$C_3(3)$	$C_3(3)$	1	1	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0
3	$(AC)^2$	$C_3^{-1}(3)$	$C_3^{-1}(3)$	1	1	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$
3	ABC	$C_3(4)$	$C_3(4)$	1	1	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0
3	$(ABC)^2$	$C_3^{-1}(4)$	$C_3^{-1}(4)$	1	1	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$
4	BD	$S_4(x)$	$C_4^{-1}(x)$	1	-1	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$
5	AB	$C_2(x)$	$C_2(x)$	1	1	$1/\sqrt{2}$	0	0	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0
4	AD	$S_4^{-1}(x)$	$C_4(x)$	1	-1	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$
4	DABC	$S_4(y)$	$C_4^{-1}(y)$	1	-1	$-1/\sqrt{2}$	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	0	$1/\sqrt{3}$	0
5	B	$C_2(y)$	$C_2(y)$	1	1	$1/\sqrt{2}$	0	0	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0
4	$(ABC)^2D$	$S_4^{-1}(y)$	$C_4(y)$	1	-1	$-1/\sqrt{2}$	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0
4	ABCD	$S_4(z)$	$C_4^{-1}(z)$	1	-1	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0
5	A	$C_2(z)$	$C_2(z)$	1	1	$1/\sqrt{2}$	0	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0
4	BCD	$S_4^{-1}(z)$	$C_4(z)$	1	-1	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0

Tabelle XVII (Fortsetzung).

N_{\otimes_4}

$\Gamma_{22}^{(4)}$	$\Gamma_{23}^{(4)}$	$\Gamma_{31}^{(4)}$	$\Gamma_{32}^{(4)}$	$\Gamma_{33}^{(4)}$	$\Gamma_{11}^{(5)}$	$\Gamma_{12}^{(5)}$	$\Gamma_{13}^{(5)}$	$\Gamma_{21}^{(5)}$	$\Gamma_{22}^{(5)}$	$\Gamma_{23}^{(5)}$	$\Gamma_{31}^{(5)}$	$\Gamma_{32}^{(5)}$	$\Gamma_{33}^{(5)}$
F_1					F_2								
F_1					F_2								
$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$
0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$
0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$
$-1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	0
$-1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0
0	$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0
0	$-1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0
0	$-1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0
0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0
0	$-1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0
0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0
0	$1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0
0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0
0	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0
0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0
0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$
$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$
0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$
$1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	0
$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$
$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0
0	$-1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0
$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$
0	$1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	$-1/\sqrt{3}$	0

$\frac{1}{\sqrt{24}}$

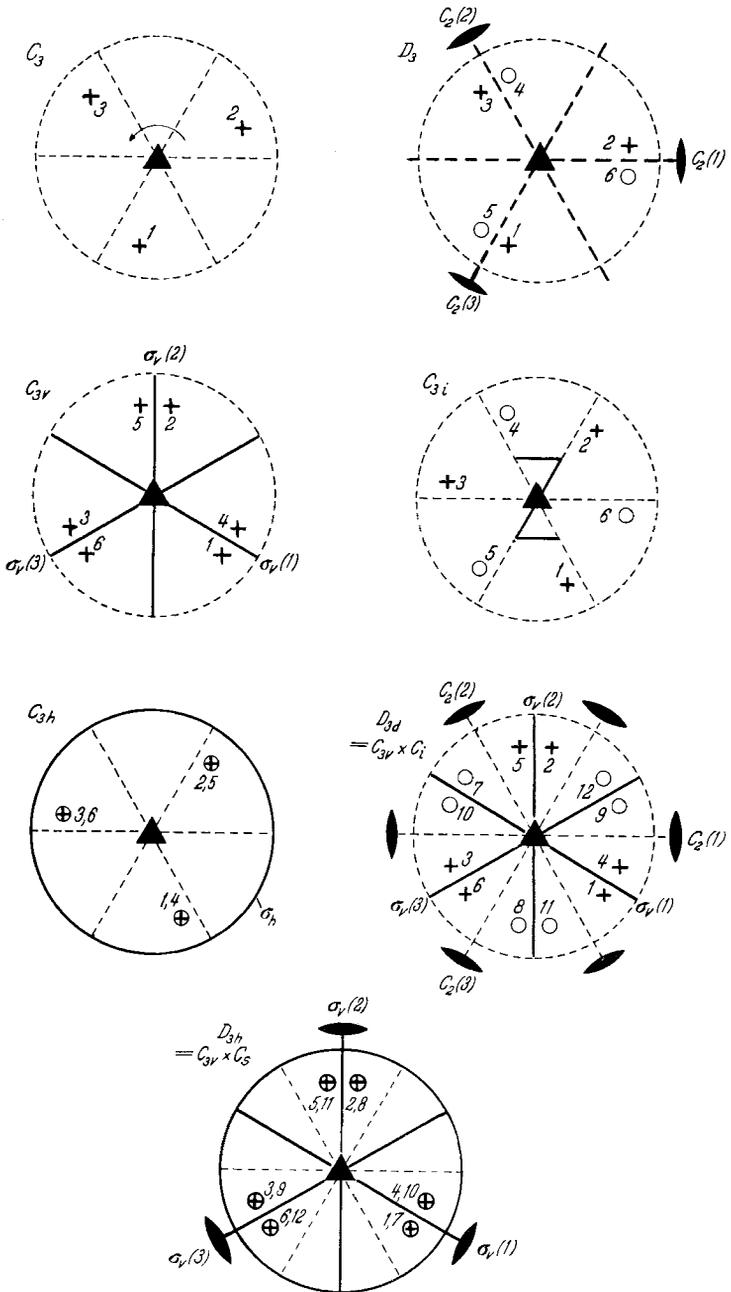


Fig. 3.

Trigonale Gruppen.

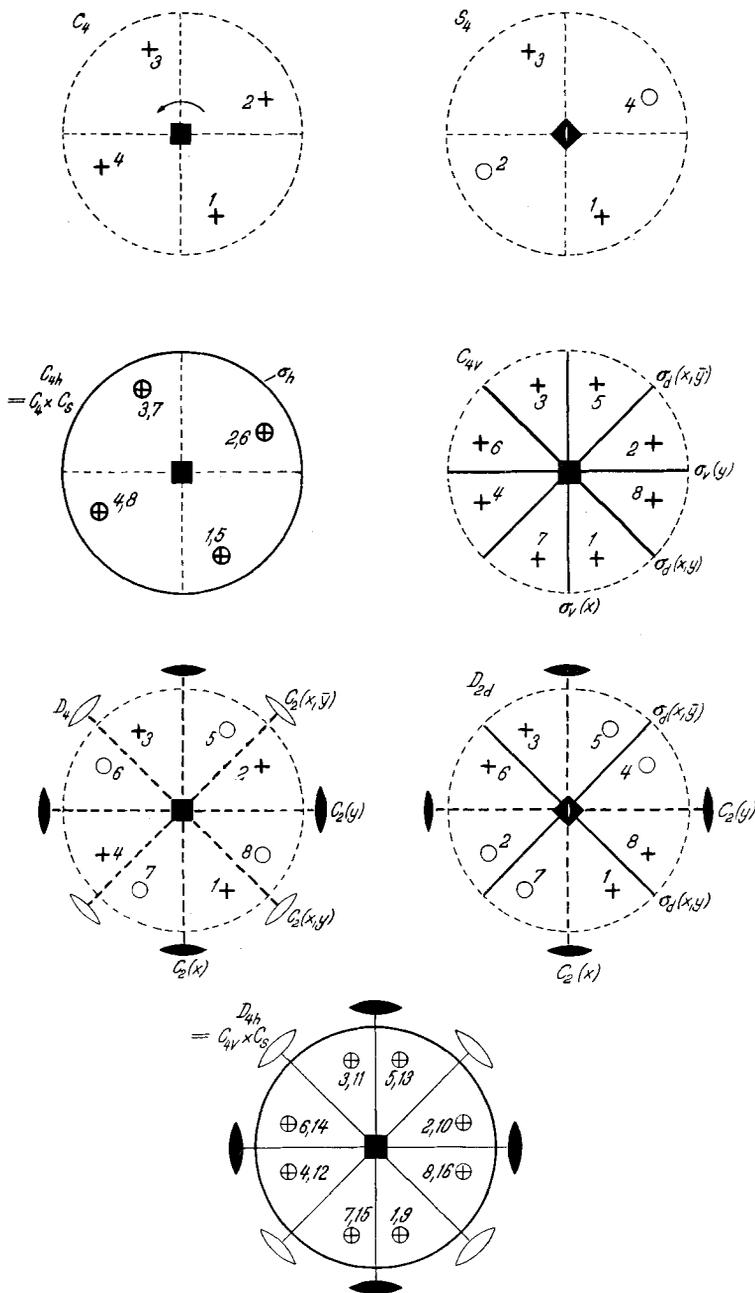


Fig. 4.

Tetragonale Gruppen.

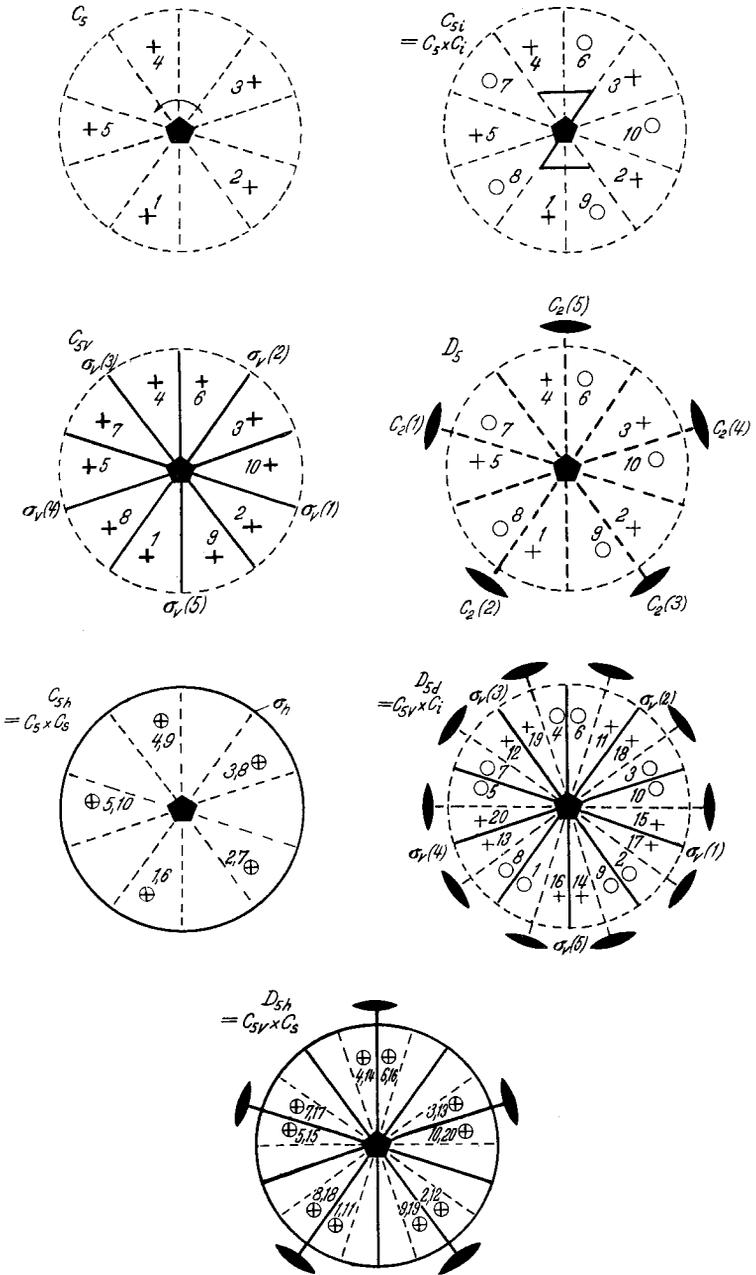


Fig. 5.

Pentagonale Gruppen.

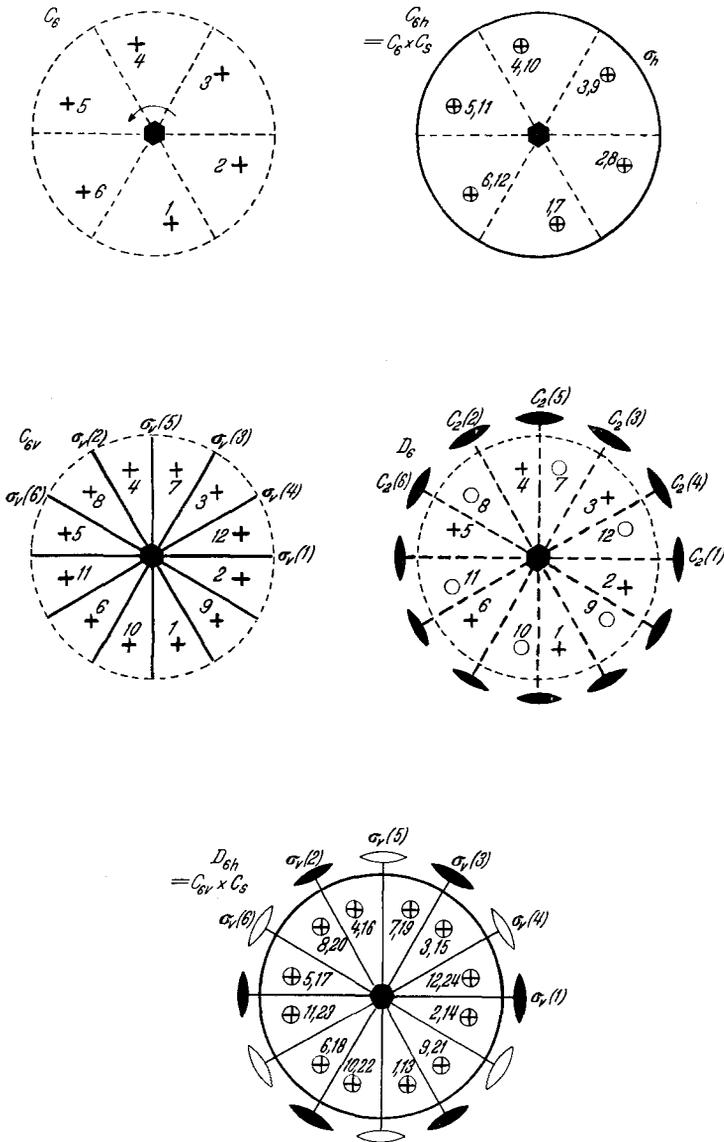


Fig. 6.
Hexagonale Gruppen.

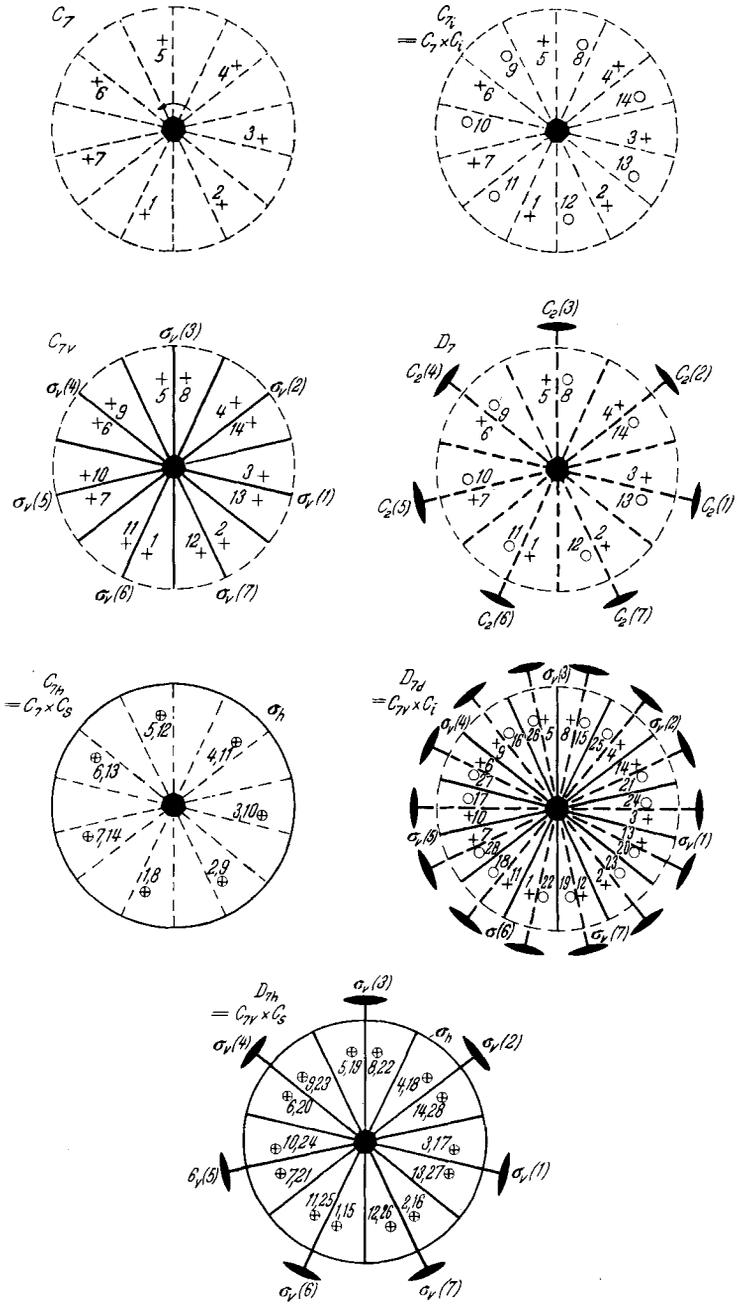


Fig. 7.

Heptagonale Gruppen.

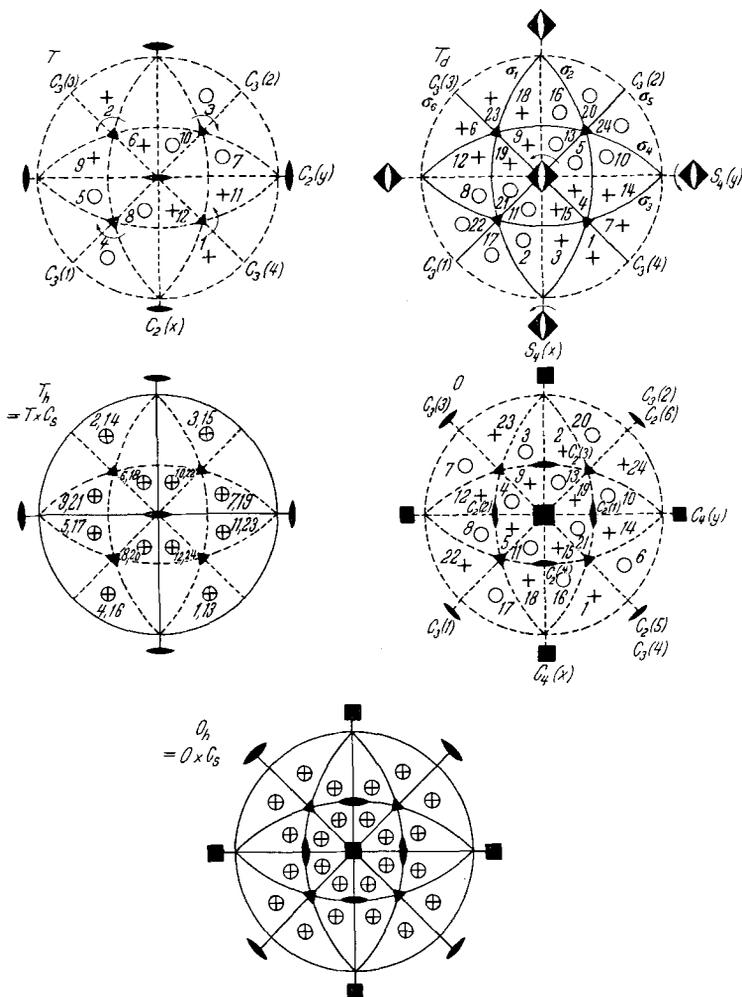


Fig. 8. Kubische Gruppen.

Zusammenfassung.

Für die wichtigsten endlichen Punktsymmetriegruppen werden vollständige Systeme irreduzibler Darstellungen angegeben. Mit deren Hilfe werden durch Linearkombination von s-Einelektronen – Atom-eigenfunktionen (s-AO) Einelektronen – Molekeleigenfunktionen (MO) nullter Näherung gebildet, die zu den irreduziblen Darstellungen der behandelten Gruppen gehören. Die zu berechnenden MO's können direkt zum Aufstellen der irreduziblen Bestandteile der Säkulargleichung bei MO-Problemen der theoretischen Chemie verwendet werden.

Organisch-chemisches Institut der Eidg. Technischen Hochschule, Zürich.