45. Molekel-Eigenfunktionen bestimmter Symmetrie: Linearkombinationen von P-Funktionen.
Teil III: Zusammenfassung und Tabellen

von E. Heilbronner[1]).

(6. X. 54.)

An eine frühere Veröffentlichung über Linearkombinationen von S-Funktionen[2]) anschliessend, haben wir im Teil I dieser Arbeit[3]) eine Methode entwickelt, mittels welcher sich – bei Kenntnis gewisser Matrizen – die richtigen Linearkombinationen der P-AO's einer Molekel gegebener Punktsymmetrie direkt erhalten lassen. Dieses Verfahren wurde am Beispiel von Molekel-Eigenfunktionen der Symmetrie C_{3v} und D_3 illustriert (siehe Teil II[4])). Im vorliegenden dritten und letzten Teil werden die Rechenvorschriften zusammenfassend dargestellt und jene Matrizen tabellarisch angegeben, die zur systematischen Anwendung der Methode notwendig sind[5]).

Zusammenfassung der Methode.

Gegeben sei eine symmetrische Molekel, bestehend aus Sätzen äquivalenter Atome, für welche die Punktsymmetrie der g Gleichgewichtslagen ihrer Atomkerne mit der abstrakten Gruppe $\mathfrak{G}$ holoedrisch isomorph sei. Jedem Atomkern seien drei zueinander orthogonale, normierte P-AO's zugeordnet, die in ihrer komplexen Gestalt $p_{-1}^{(i)}\, p_0^{(i)}\, p_{+1}^{(i)}$ angenommen werden sollen[6]).

Erfolgt die Numerierung der Atomkerne eines Satzes – und damit auch der ihnen zukommenden drei P-AO's – nach der früher im Teil I beschriebenen Regel[7]), so lassen sich die 3g P-AO's eines Satzes[8]) in Form eines Zeilenvektors $\widetilde{\{p\}}$ anordnen:

$$\widetilde{\{p\}} = \left(p_{-1}^{(1)}\, p_0^{(1)}\, p_{+1}^{(1)}\, p_{-1}^{(2)}\, p_0^{(2)} \;\cdots\; p_0^{(g)}\, p_{+1}^{(g)}\right). \tag{1}$$

[1]) Die mit dem vorliegenden Teil III abgeschlossene Reihe über Linearkombinationen von P-Funktionen bildet einen Auszug aus: *E. Heilbronner*, Habilitationsschrift, Eidg. Technische Hochschule, Zürich, 1954.

[2]) *Hs. H. Günthard, E. Heilbronner & B. Messikommer*, Helv. **35**, 2149 (1952).

[3]) *E. Heilbronner & Hs. H. Günthard*, Helv. **37**, 1037 (1954).

[4]) *E. Heilbronner & Hs. H. Günthard*, Helv. **37**, 1534 (1954).

[5]) Jene Formeln des Teils I bzw. des Teils II, welche die Laufzahl r aufweisen, sollen hier jeweils durch das Symbol (I,r) bzw. (II,r) gekennzeichnet werden.

[6]) Vgl. Teil I, Seite 1038, Fussnote 2.

[7]) Vgl. Teil I, Seite 1038, Absatz 5.

[8]) Befinden sich Atome in speziellen Lagen, so sind die richtigen Linearkombinationen mittels einfacher Regeln leicht abzuleiten: *Hs. H. Günthard, E. Heilbronner & B. Messikommer*, Helv. **35**, 2149 (1952).

Gesucht ist jene Matrix $\mathbf{M}$, welche durch linksseitige Multiplikation mit dem Zeilenvektor $\widetilde{\{p\}}$ den Zeilenvektor $\widetilde{\{\varphi\}}$ der richtigen Linearkombinationen φ_i ergibt:

$$\widetilde{\{\varphi\}} = \widetilde{\{p\}}\,\mathbf{M}. \qquad (I,26)$$

Wie in den Teilen I und II gezeigt wurde, lässt sich der Aufbau dieser Matrix $\mathbf{M}$ in Funktion anderer Matrizen $\mathbf{N}$, $\mathbf{T}$, $\mathbf{V}$ und $\mathbf{U}^{(i,j)}$ definieren.

$$\boxed{\mathbf{M} = (\mathbf{N} \times \mathbf{T})\,\mathbf{V}\left(\sum_{i,j} l_i\, t_j\, \mathbf{U}^{(i,j)}\right)}\ ^{9)} \qquad (2)$$

Bei vorgegebener Symmetrie der Molekel (d. h. bei gegebener Gruppe $\mathfrak{G}$) ist demnach ausschliesslich die Kenntnis der entsprechenden Matrizen $\mathbf{N}$, $\mathbf{T}$, $\mathbf{V}$ und $\mathbf{U}^{(i,j)}$ sowie der Zahlen l_i und t_j notwendig, um für beliebige Symmetriegruppen die richtigen Linearkombinationen direkt zu erhalten. Im vorliegenden Teil III sollen nun diese Matrizen beschrieben und in Tab. explizite angegeben werden.

Matrizen N.

Die Matrizen $\mathbf{N}$ wurden bereits früher definiert (I,8) und eingehend beschrieben (Teil I, Seite 1039, sowie[10]). Sie bestehen aus den normierten Stellenzeilen eines vollständigen Systems aller irreduziblen Darstellungen $\Gamma^{(i)}$ der Gruppe $\mathfrak{G}$.

Matrizen T.

Die Definition der Matrizen $\mathbf{T}$ ist durch die Relation (I,20) gegeben. Die zu zerlegenden Matrizen $\mathbf{D}(G_k)$ vom Grad 3 entstammen der dreidimensionalen Drehungsgruppe und beziehen sich auf die in komplexer Gestalt angenommenen P-Funktionen. (Vgl. Teil I, Seite 1038, Absatz 3 und Fussnote 2.)

Da die Matrizen $\mathbf{D}(G_k)$ sämtlich vom Grad 3 sind, können ausschliesslich die folgenden Fälle auftreten:

α) Die Matrizen $\mathbf{D}(G_k)$ bilden selbst eine irreduzible Darstellung der Gruppe $\mathfrak{G}$. In diesem Fall ist $\mathbf{T}$ die Einheitsmatrix.

β) Die Matrizen $\mathbf{D}(G_k)$ lassen sich in eine eindimensionale und in eine zweidimensionale irreduzible Darstellung zerlegen.

γ) Die Matrizen $\mathbf{D}(G_k)$ lassen sich in drei eindimensionale Darstellungen zerlegen. In diesem Fall befinden sich die Matrizen $\mathbf{D}(G_k)$

---

[9]) Im Teil I wurde die Formel (2) ohne die Vertauschungsmatrix $\mathbf{V}$ angegeben (I,25), wobei explizit auf die Forderung hingewiesen wurde, dass in $(\mathbf{N} \times \mathbf{T})$ die Anordnung der Elemente entsprechend den Angaben der Abschnitte α) und β) (Teil I, Seite 1043) zu geschehen habe. (Vgl. Teil II, Seite 1534, Fussnote 4, und Seite 1540, Fussnote 1.) Um Missverständnisse zu vermeiden, sei diese triviale Vertauschung der Elemente in $(\mathbf{N} \times \mathbf{T})$ durch Angabe der Vertauschungsmatrix $\mathbf{V}$ gekennzeichnet.

[10]) *Hs. H. Günthard, E. Heilbronner & B. Messikommer*, Helv. **35**, 2149 (1952). Die dort in Tab. angegebenen Matrizen $\mathbf{N}$ (im Teil I als $\mathbf{N}'$ bezeichnet) sind entsprechend (I,11) mit Vertauschungsmatrizen (I,12) bzw. (I,13) zu multiplizieren, damit sie der Forderung genügen, die reguläre Darstellung $\Gamma^{(\mathrm{reg.})}$ in eine direkte Summe irreduzibler Darstellungen $\Gamma^{(i)}$ in natürlicher Reihenfolge zu zerlegen.

in allen uns interessierenden Fällen bereits auf Diagonalform. T ist dann, gleich wie im Fall α), die Einheitsmatrix.

Tabelle I.
Matrizen **T**.

Fall	Die Darstellung D enthält die irreduziblen Darstellungen	Matrix **T**
α)	$\Gamma^{(r)}$; $[\Gamma^{(r)}] = 3$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
β)	$\Gamma^{(r)} + \Gamma^{(s)}$; $[\Gamma^{(r)}] = 2$; $[\Gamma^{(s)}] = 1$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
γ)	$\Gamma^{(r)} + \Gamma^{(s)} + \Gamma^{(t)}$; $[\Gamma^{(r)}] = [\Gamma^{(s)}] = [\Gamma^{(t)}] = 1$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Matrizen **V** der Formel (2).

Jene Vertauschungsmatrix $\mathbf{V}$[11]) der Formel (2), welche der im Teil I, Seite 1043, Absatz β), beschriebenen Forderung entspricht, lässt sich leicht unter Berücksichtigung der folgenden Angaben ableiten.

Das in (I, 22) definierte direkte Produkt zweier direkter Summen irreduzibler Darstellungen

$$\left(\sum_{i} l_i \boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k)\right) \times \left(\sum_{i} t_j \boldsymbol{\Gamma}^{(j)}(G_k)\right) \tag{3}$$

ist, nach einem Satz der Matrizenalgebra, identisch mit der direkten Summe von direkten Produkten

$$\sum_{i} l_i \left(\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k) \times \sum_{j} t_j \boldsymbol{\Gamma}^{(j)}(G_k)\right). \tag{4}$$

Da nun die Matrizen $\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k)$ in allen uns interessierenden Fällen stets vom Grad 1, 2 oder 3 sind und da, entsprechend (I, 20) und dem vorhergehenden Abschnitt des vorliegenden Teils, für die direkte Summe $\sum_{j} t_j \Gamma^{(j)}(G_k)$ nur die drei Fälle α, β und γ auftreten können, resultieren ausschliesslich 9 Möglichkeiten für die Glieder der Summe (4). Es sind dies:

$$\left\{\begin{array}{ll} [\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k)] = 1, 2, 3 & \text{und Fall } \alpha. \\ [\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k)] = 1 & \text{und Fälle } \beta \text{ und } \gamma. \end{array}\right.$$
$$[\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k)] = 2, 3 \quad \text{und Fälle } \beta \text{ und } \gamma.$$

Bei den ersten fünf durch eine geschweifte Klammer ausgezeichneten Kombinationen erhält man die direkte Summe der direkten Produkte irreduzibler Darstellungen jeweils in der gewünschten Reihenfolge, so dass keine Vertauschungen von Zeilen und Kolonnen vorgenommen werden müssen. In den restlichen vier Kombinationen muss die geforderte Reihenfolge der direkten Produkte irreduzibler Dar-

[11]) Diese Matrix darf nicht mit jenen Vertauschungsmatrizen verwechselt werden, die im Teil I (I, 11) definiert wurden.

stellungen, entsprechend (5), mittels einer Vertauschungsmatrix **v** bewerkstelligt werden:

$$\tilde{\mathbf{v}}\left(\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k) \times \sum_j t_j \boldsymbol{\Gamma}^{(j)}(G_k)\right) \mathbf{v} = \sum_j t_j \boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k) \times \boldsymbol{\Gamma}^{(j)}(G_k). \tag{5}$$

Die Vertauschungsmatrix **V**, die sich auf das Produkt (3) bezieht, besteht aus der direkten Summe von Einheitsmatrizen (entsprechend den fünf mit einer geschweiften Klammer ausgezeichneten Kombinationen) und von Vertauschungsmatrizen **v** vom oben angegebenen Typus. Die, in letzteren Matrizen, von Null verschiedenen Elemente v_{rs} sind:

Tabelle II.

Kombination	Matrix **v**, Grad:	Von Null verschiedene Elemente: $v_{rs} = 1$
$[\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k)] = 2$, Fall β	6	$v_{11}\ v_{23}\ v_{34}\ v_{42}\ v_{55}\ v_{66}$
$[\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k)] = 2$, Fall γ	6	$v_{11}\ v_{23}\ v_{35}\ v_{42}\ v_{54}\ v_{66}$
$[\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k)] = 3$, Fall β	9	$v_{11}\ v_{24}\ v_{35}\ v_{42}\ v_{56}\ v_{67}\ v_{73}\ v_{88}\ v_{99}$
$[\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_k)] = 3$, Fall γ	9	$v_{11}\ v_{24}\ v_{37}\ v_{42}\ v_{55}\ v_{68}\ v_{73}\ v_{86}\ v_{99}$

So entspricht beispielsweise in dem im Teil II beschriebenen Beispiel die Zerlegung von $\mathbf{D}(G_k)$ dem Fall β (siehe die Formeln (II,6) und (II,7)). Jene Vertauschungsmatrix **V**, welche das dort angegebene direkte Produkt

$$\left(\boldsymbol{\Gamma}^{(1)}(G_k) + \boldsymbol{\Gamma}^{(2)}(G_k) + 2\,\boldsymbol{\Gamma}^{(3)}(G_k)\right) \times \left(\boldsymbol{\Gamma}^{(1)}(G_k) + \boldsymbol{\Gamma}^{(3)}(G_k)\right)$$

umordnet, enthält demnach zweimal ($l_3 = 2$) die in der ersten Zeile der obigen Tab. beschriebene Submatrix v, so dass sie folgende Form annimmt:

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathbf{E} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{v} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{v} \end{pmatrix}; \qquad \mathbf{v} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$\mathbf{E}$ = Einheitsmatrix, $[\mathbf{E}] = 6$, $\mathbf{0}$ = Nullmatrix.

Es ist zu beachten, dass die Reihenfolge der Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$ in der direkten Summe $\sum_{i,j} l_i t_j \mathbf{U}^{(i,j)}$ auf die Reihenfolge der direkten Summe von Produkten irreduzibler Darstellungen, so wie sie durch **V** hervorgerufen wird, abzustimmen ist.

Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$.

Die Definition der Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)} = (U_{rs}^{(i,j)})$ ist durch die Relation (I,21) gegeben. Die Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$ sind alle in unitärer Gestalt angenommen.

Es sei hier kurz auf den Zusammenhang zwischen den Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$ und $\mathbf{U}^{(j,i)}$ hingewiesen:

Laut Definition ist:

$$\mathbf{U}^{(i,j)\dagger}(\Gamma^{(i)} \times \Gamma^{(j)})\,\mathbf{U}^{(i,j)} = \sum_k c_k\,\Gamma^{(k)}; \qquad \mathbf{U}^{(j,i)\dagger}(\Gamma^{(j)} \times \Gamma^{(i)})\,\mathbf{U}^{(j,i)} = \sum_k c_k\,\Gamma^{(k)}.$$

Da nun $\Gamma^{(i)} \times \Gamma^{(j)}$ und $\Gamma^{(j)} \times \Gamma^{(i)}$ die gleichen Elemente in verschiedener Anordnung enthalten, kann immer eine Vertauschungsmatrix $\mathbf{Q}$ gefunden werden, so dass:

$$(\Gamma^{(i)} \times \Gamma^{(j)}) = \tilde{\mathbf{Q}}\,(\Gamma^{(j)} \times \Gamma^{(i)})\,\mathbf{Q}.$$

Daraus ergibt sich, dass:

$$\mathbf{U}^{(j,i)} = \mathbf{Q}\,\mathbf{U}^{(i,j)}.$$

Die Matrix $\mathbf{Q}$ lässt sich leicht wie folgt ableiten: $\Gamma^{(i)}$ sei vom Grad l_i und $\Gamma^{(j)}$ vom Grad l_j. Dann lässt sich die Matrix $\mathbf{Q}$ in Untermatrizen teilen, so dass jede Untermatrix $\mathbf{Q}^{rs} = (Q^{rs}_{uv})$ aus l_j Kolonnen und l_i Zeilen besteht:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{11} & \mathbf{Q}^{12} & \dots & \mathbf{Q}^{1 l_i} \\ \mathbf{Q}^{21} & \mathbf{Q}^{22} & \dots & \mathbf{Q}^{2 l_i} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{Q}^{l_j 1} & \mathbf{Q}^{l_j 2} & \dots & \mathbf{Q}^{l_j l_i} \end{pmatrix}.$$

In jeder Submatrix $\mathbf{Q}^{rs}$ ist dann einzig das Element Q^{rs}_{sr} von Null verschieden und gleich 1; das heisst, dass die Elemente der Submatrizen $\mathbf{Q}^{rs}$ durch die Relation

$$Q^{rs}_{uv} = \delta_{us}\,\delta_{vr}$$

bestimmt sind.

Tabelle III.

Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$.

Gruppe $\mathfrak{D}_3$, isomorph: D_3, C_{3v}.

i \ j	$\Gamma^{(3)} = E$
$\Gamma^{(3)} = E$	$\mathbf{U}^{(3,3)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(3)} =$ $A_1 + A_2 + E$

Gruppe $\mathfrak{D}_4$, isomorph: D_4, C_{4v}, D_{2d}.

i \ j	$\Gamma^{(5)} = E$
$\Gamma^{(5)} = E$	$\mathbf{U}^{(5,5)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(3)} + \Gamma^{(4)}$ $= A_1 + A_2 + B_1 + B_2$

Gruppe $\mathfrak{D}_5$, isomorph: D_5, C_{5v}.

i \ j	$\Gamma^{(3)} = E_1$	$\Gamma^{(4)} = E_2$
$\Gamma^{(3)} = E_1$	$\mathbf{U}^{(3,3)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\mathbf{U}^{(3,4)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(4)}$ $= A + B + E_2\ (D_5)$ $= A_1 + A_2 + E_2\ (C_{5v})$	$\Gamma^{(3)} + \Gamma^{(4)}$ $= E_1 + E_2$
$\Gamma^{(4)} = E_2$	$\mathbf{U}^{(4,3)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\mathbf{U}^{(4,4)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(3)} + \Gamma^{(4)}$ $E_1 + E_2$	$\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(3)}$ $= A + B + E_1\ (D_5)$ $= A_1 + A_2 + E_1\ (C_{5v})$

Gruppe $\mathfrak{D}_6$, isomorph: D_6, C_{6v}.

i \ j	$\Gamma^{(5)} = E_1$	$\Gamma^{(6)} = E_2$
$\Gamma^{(5)} = E_1$	$\mathbf{U}^{(5,5)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\mathbf{U}^{(5,6)}$ $\begin{pmatrix} 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(6)}$ $= A_1 + A_2 + E_2$	$\Gamma^{(3)} + \Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)}$ $= B_1 + B_2 + E_1$
$\Gamma^{(6)} = E_2$	$\mathbf{U}^{(6,5)}$ $\begin{pmatrix} 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\mathbf{U}^{(6,6)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(3)} + \Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)}$ $= B_1 + B_2 + E_1$	$\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(6)}$ $= A_1 + A_2 + E_2$

Gruppe $\mathfrak{D}_7$, isomorph: D_7, C_{7v}.

i \ j	$\Gamma^{(3)} = E_1$	$\Gamma^{(4)} = E_2$	$\Gamma^{(5)} = E_3$
$\Gamma^{(3)} = E_1$	$\mathbf{U}^{(3,3)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\mathbf{U}^{(3,4)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\mathbf{U}^{(3,5)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(4)}$ $= A \quad + B \quad + E_2 \, (D_7)$ $= A_1 \quad + A_2 \quad + E_2 \, (C_{7v})$	$\Gamma^{(3)} + \Gamma^{(5)}$ $= E_1 \quad + E_3$	$\Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)}$ $= E_2 \quad + E_3$
$\Gamma^{(4)} = E_2$	$\mathbf{U}^{(4,3)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\mathbf{U}^{(4,4)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\mathbf{U}^{(4,5)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(3)} + \Gamma^{(5)}$ $= E_1 \quad + E_3$	$\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(5)}$ $= A \quad + B \quad + E_3 \, (D_7)$ $= A_1 \quad + A_2 \quad + E_3 \, (C_{7v})$	$\Gamma^{(3)} + \Gamma^{(4)}$ $= E_1 \quad + E_2$
$\Gamma^{(5)} = E_3$	$\mathbf{U}^{(5,3)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\mathbf{U}^{(5,4)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\mathbf{U}^{(5,5)}$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)}$ $= E_2 \quad + E_3$	$\Gamma^{(3)} + \Gamma^{(4)}$ $= E_1 \quad + E_2$	$\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(3)}$ $= A \quad + B \quad + E_1 \, (D_7)$ $= A_1 \quad + A_2 \quad + E_1 \, (C_{7v})$

Gruppe $\mathfrak{A}_4$, isomorph: T.

i \ j	$\Gamma^{(4)} = \mathrm{F}$
$\Gamma^{(4)} = \mathrm{F}$	$\mathbf{U}^{(4,4)}$ $\begin{pmatrix} 3^{\frac12} & 3^{-\frac12} & 3^{-\frac12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac12} & 0 & 0 & 2^{-\frac12} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac12} & 0 & 0 & -2^{-\frac12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac12} & 0 & 0 & -2^{-\frac12} \\ 3^{-\frac12} & (1)/\sqrt{3} & (2)/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac12} & 0 & 0 & 2^{-\frac12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac12} & 0 & 0 & 2^{-\frac12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac12} & 0 & 0 & -2^{-\frac12} & 0 & 0 \\ 3^{\frac12} & (2)/\sqrt{3} & (1)/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(1)} + \underbrace{\Gamma^{(2)} + \Gamma^{(3)}}_{+\mathrm{E}} + 2\,\Gamma^{(4)}$ $= \mathrm{A} \quad + \mathrm{E} \quad + 2\,\mathrm{F}$

Klammersymbol: $n = 3$[12]).

Gruppe $\mathfrak{S}_4$, isomorph: T_d, O[13]).
(Die Matrix $\mathbf{U}^{(3,3)}$ der Gruppe $\mathfrak{S}_4$ ist identisch mit der Matrix gleicher Indizes der Gruppe $\mathfrak{D}_3$.)

j \ i	$\Gamma^{(3)} = \mathrm{E}$
$\Gamma^{(4)} = \mathrm{F}_1$	$\mathbf{U}^{(3,4)}$ $\begin{pmatrix} 2^{\frac12} & 0 & 0 & 2^{\frac12} & 0 & 0 \\ 0 & (2)/\sqrt{2} & 0 & 0 & -(2)/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} & 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} \\ (2)/\sqrt{2} & 0 & 0 & -(2)/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 2^{\frac12} & 0 & 0 & 2^{\frac12} & 0 \\ 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} & 0 & 0 & -(1)/\sqrt{2} \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)} = \mathrm{F}_1 + \mathrm{F}_2$
$\Gamma^{(5)} = \mathrm{F}_2$	$\mathbf{U}^{(3,5)}$ $\begin{pmatrix} 2^{-\frac12} & 0 & 0 & 2^{-\frac12} & 0 & 0 \\ 0 & -(2)/\sqrt{2} & 0 & 0 & (2)/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} & 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} \\ -(2)/\sqrt{2} & 0 & 0 & (2)/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 2^{-\frac12} & 0 & 0 & 2^{-\frac12} & 0 \\ 0 & 0 & -(1)/\sqrt{2} & 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)} = \mathrm{F}_1 + \mathrm{F}_2$

Klammersymbol: $n = 3$.

[12]) Die Klammersymbole (k) bedeuten:

$$(\mathrm{k}) \equiv \exp \frac{2\pi\sqrt{-1}}{n}\,\mathrm{k}. \qquad (\mathrm{I}, 27)$$

Der Parameter n, der für die gesamte Matrix konstant bleibt, wird jeweils explizit angegeben. Betreffend weitere Angaben vgl. Teil I, Seite 1044.

[13]) Man beachte, dass in manchen der folgenden Tab. aus satztechnischen Gründen die Indizes i und j links oben im Tabellenkopf vertauscht sind.

i \ j	$\Gamma^{(3)} = \mathrm{E}$
$\Gamma^{(4)} = \mathrm{F}_1$	$\mathbf{U}^{(4,3)}$ $\begin{pmatrix} 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ (2)/\sqrt{2} & 0 & 0 & -(2)/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & (2)/\sqrt{2} & 0 & 0 & -(2)/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} & 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} & 0 & 0 & -(1)/\sqrt{2} \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)} = \mathrm{F}_1 + \mathrm{F}_2$
$\Gamma^{(5)} = \mathrm{F}_2$	$\mathbf{U}^{(5,3)}$ $\begin{pmatrix} 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ -(2)/\sqrt{2} & 0 & 0 & (2)/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & -(2)/\sqrt{2} & 0 & 0 & (2)/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} & 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & -(1)/\sqrt{2} & 0 & 0 & (1)/\sqrt{2} \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)} = \mathrm{F}_1 + \mathrm{F}_2$

j \ i	$\Gamma^{(4)} = \mathrm{F}_1$
$\Gamma^{(4)} = \mathrm{F}_1$	$\mathbf{U}^{(4,4)}$ $\begin{pmatrix} 3^{-\frac{1}{2}} & 3^{-\frac{1}{2}} & (1)/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^{\ \frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2^{\ \frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} \\ 3^{-\frac{1}{2}} & (1)/\sqrt{3} & 3^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 3^{-\frac{1}{2}} & (2)/\sqrt{3} & (2)/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(3)} + \Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)} = \mathrm{A}_1 + \mathrm{E} + \mathrm{F}_1 + \mathrm{F}_2$
$\Gamma^{(5)} = \mathrm{F}_2$	$\mathbf{U}^{(4,5)}$ $\begin{pmatrix} 3^{-\frac{1}{2}} & 3^{-\frac{1}{2}} & -(1)/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^{\ \frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} \\ -3^{-\frac{1}{2}} & -(1)/\sqrt{3} & 3^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & -2^{\ \frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & -2^{\ \frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 3^{-\frac{1}{2}} & (2)/\sqrt{3} & -(2)/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(2)} + \Gamma^{(3)} + \Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)} = \mathrm{A}_2 + \mathrm{E} + \mathrm{F}_1 + \mathrm{F}_2$

j	$\Gamma^{(5)} = F_2$
$\Gamma^{(4)} = F_1$	$\mathbf{U}^{(5,4)}$ $\begin{pmatrix} 3^{-\frac{1}{2}} & 3^{\frac{1}{2}} & -(1)/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} \\ -3^{-\frac{1}{2}} & -(1)/\sqrt{3} & 3^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 3^{-\frac{1}{2}} & (2)/\sqrt{3} & -(2)/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(2)} + \Gamma^{(3)} + \Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)} = A_2 + E + F_1 + F_2$
$\Gamma^{(5)} = F_2$	$\mathbf{U}^{(5,5)}$ $\begin{pmatrix} 3^{-\frac{1}{2}} & 3^{-\frac{1}{2}} & (1)/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} \\ 3^{-\frac{1}{2}} & (1)/\sqrt{3} & 3^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 3^{-\frac{1}{2}} & (2)/\sqrt{3} & (2)/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
	$\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(3)} + \Gamma^{(4)} + \Gamma^{(5)} = A_1 + E + F_1 + F_2$

Anhang.

Berechnung der Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$.

Zur Berechnung der Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$ stehen zwei Methoden zur Verfügung. Über die gruppentheoretischen Grundlagen der ersten dieser Methoden soll in einem anderen Zusammenhang und zu einem späteren Zeitpunkt eingehender berichtet werden. Sie erlaubt, die Elemente $U_{rs}^{(i,j)}$ der Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$ direkt zu berechnen.

Die zweite Methode, die in vielen, aber nicht in allen Fällen schnell zum Ziele führt, kann unter Umständen zu recht beträchtlichen Rechenarbeiten Anlass geben.

Methode I: Die für die Berechnung der Elemente $U_{rs}^{(i,j)}$ notwendigen Hinweise seien hier kurz zusammengefasst:

Gegeben sei eine reduzible Darstellung Γ, die auf bekannte Art[14]) in eine Reihe irreduzibler Darstellungen $\Gamma^{(i)}$ zerlegt werden kann. Sei $\mathbf{U}$ jene Matrix, die diese Zerlegung[15]) bewerkstelligt:

$$\mathbf{U}^{-1} \Gamma \mathbf{U} = \sum_k c_k \Gamma^{(k)}. \tag{1'}$$

---

[14]) Die Art der Zerlegung, das heisst Zahl und Typus der irreduziblen Darstellungen, die in Γ enthalten sind, lassen sich auf die übliche Art und Weise den Charakterentabellen der entsprechenden Gruppen entnehmen.

[15]) Wir wollen dabei annehmen, dass die Zerlegung so erfolgt, dass sich die irreduziblen Darstellungen in ihrer natürlichen Reihenfolge präsentieren.

Zur näheren Präzisierung sollen die folgenden Symbole Verwendung finden:

$$\boldsymbol{\Gamma}^{(k)}(G_l) = \left(\Gamma_{ij}^{(k)}(G_l)\right); \quad \boldsymbol{\Gamma}(G_l) = (\Gamma_{ij}(G_l)); \quad \mathbf{U}^{-1} = \left(U_{ij}^{-1}\right); \quad \mathbf{U} = (U_{ij}).$$

Es ist von Vorteil, die direkte Summe der irreduziblen Darstellungen $\Gamma^{(k)}$ (rechte Seite der Gleichung (1′)) wie folgt zu schreiben:

$$\sum_k c_k \Gamma^{(k)} = \sum_r \Gamma^{(r)}. \tag{2′}$$

Darunter wollen wir verstehen, dass die irreduziblen Darstellungen nun laufend durchnumeriert worden sind, wobei es offensichtlich vorkommen kann, dass die gleiche irreduzible Darstellung mit verschiedenen Indizes in eckigen Klammern des öfteren auftritt. Die Relation (2′) erlaubt auch eine einfache Bezeichnung der Elemente von $\sum_r \Gamma^{[r]}$ mittels je zwei Zeilen- und Kolonnenindizes

$$\sum \boldsymbol{\Gamma}^{[r]}(G_l) = \left(\Gamma_{rs,\,tu}(G_l)\right) = \left(\delta_{rt}\, \Gamma_{su}^{[r]}(G_l)\right). \tag{3′}$$

Mit Hilfe der hyperkomplexen Zahlen[16]) lässt sich nun auf einem Wege, über den an anderem Orte berichtet werden soll, eine Beziehung ableiten, die die direkte Berechnung der Elemente der Matrix $\mathbf{U}$ erlaubt. Insbesondere nimmt diese Beziehung für den Fall, dass in der direkten Summe der Gleichung (1′) jede irreduzible Darstellung nur einmal vorkommt, d. h. wenn alle $\Gamma^{[r]} \neq \Gamma^{[s]}$ für $r \neq s$ sind, die Form (4′) an:

$$\sum_{G_l} \Gamma_{ij}(G_l)\, \Gamma_{us}^{[s]*}(G_l) = g/l_r\, U_{i,\,ru}\, U_{j,\,rs}^{*}. \tag{4′}$$

Mittels (4′) lassen sich die Elemente $U_{i,\,ru}$ der Matrizen $\mathbf{U}$ berechnen, wenn ein von Null verschiedenes Element $U_{j,\,rs}^{*} = 0$ bekannt ist, welches zu einer Kolonne gehört, die der gleichen irreduziblen Darstellung $\Gamma^{[r]}$ zugeordnet ist.

Die von Null verschiedenen Elemente von U können leicht berechnet werden, indem man sich der Relation (5′) bedient, die aus (4′) unter der Annahme $i \equiv j$ und $ru \equiv rs$ erhalten werden kann:

$$U_{i,\,ru}^{*}\, U_{i,\,ru} = l_r/g \sum_{G_l} \Gamma_{ii}(G_l)\, \Gamma_{ru,\,ru}^{*}(G_l) = |U_{i,\,ru}|^2. \tag{5′}$$

Da die Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$ lediglich einen Spezialfall der hier abgeleiteten allgemeineren Zusammenhänge darstellen, ist die gestellte Aufgabe als gelöst zu betrachten.

Man geht bei der Berechnung der Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$ zweckmässig so vor, dass man zunächst die Matrix $\left(|U_{rs}^{(i,j)}|^2\right)$ in Anlehnung an (5′) wie folgt berechnet. Aus den Hauptdiagonalen der g Matrizen $\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(G_l) \times \boldsymbol{\Gamma}^{(j)}(G_l)$ bilde man, indem man die Diagonalen als Kolonnenvektoren verwendet, eine Matrix $\mathfrak{P}$ von $l_i l_j$ Zeilen und g Kolonnen. Desgleichen bildet man aus den g Hauptdiagonalen der Matrizen $(\Gamma_{ru,\,rs}(G_l)) = \sum_r \boldsymbol{\Gamma}^{[r]}(G_l)$ die Matrix $\mathfrak{Q}$ von $l_i l_j$ Zeilen und g Kolonnen. Entsprechend (5′) ist dann die quadratische Matrix $\mathfrak{P}\mathfrak{Q}^{\dagger}$ der Ordnung $l_i l_j$ identisch mit der Matrix $(g/l_r\, |U_{i,\,ru}^{(i,j)}|^2)$.

Als Beispiel sei die Gruppe $\mathfrak{D}_3$ gewählt: Die Matrix $\mathfrak{P}$ des direkten Produktes $\Gamma^{(3)} \times \Gamma^{(3)}$ ($= E \times E$) lautet:

$$\mathfrak{P} = \begin{pmatrix} 1 & (2) & (1) & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & (1) & (2) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{n der Klammersymbole} = 3.$$

Diese Matrix $\mathfrak{P}$ lässt sich leicht aus den Systemen normierter Stellenzeilen ablesen, die wir bereits früher veröffentlicht haben[1]).

---

[16]) *A. Speiser*, Theorie der Gruppen von endlicher Ordnung, New York, 1945, Seite 175. – *S. Bhagavantam & T. Venkatarayudu*, Theory of Groups and its Application to Physical Problems, Waltair, 1951, Appendix I, Seite 229.

Die durch $\mathbf{U}^{(i,j)}$ zu erzielende Zerlegung des direkten Produktes $\Gamma^{(3)} \times \Gamma^{(3)}$ in die direkte Summe $\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(3)}$ $(A_1 + A_2 + E)$ lässt sich aus den Charakteren des direkten Produktes ableiten, so dass auch die Matrix $\mathfrak{L}$ direkt angegeben werden kann:

$$\mathfrak{L} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & (1) & (2) & 0 & 0 & 0 \\ 1 & (2) & (1) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Das Produkt aus $\mathfrak{P}$ und $\mathfrak{L}^{\dagger}$ beträgt:

$$\mathfrak{P}\mathfrak{L}^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 3 \\ 3 & 3 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}.$$

Da g/l_3 die Werte $g/l_1 = g/l_2 = 6$ und $g/l_3 = 3$ annimmt, erhält man für die Matrix $(|U_{i,ru}^{(i,j)}|^2)$ folgendes Schema:

$$(|U^{(3,3)}|^2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Aus dieser Matrix lässt sich nun über die Beziehung (4′) die in Tab. III, Seite 405, angegebene Matrix $\mathbf{U}^{(3,3)}$ der Gruppe $\mathfrak{D}_3$ leicht berechnen.

Methode II. Diese Methode, die an sich trivial ist, führt, wie bereits betont, zum Teil zu recht verwickelten Rechnungen.

Sie besteht darin, dass man die Relation (1′) in der folgenden Form (6′) schreibt:

$$\Gamma \mathbf{U} = \mathbf{U} \left(\sum_{k} \Gamma^{[k]} \right), \tag{6′}$$

oder, für ein einzelnes Element der linken und der rechten Seite:

$$\sum_{\mu} \Gamma_{i\mu} U_{\mu j} = \sum_{t\nu} U_{rs,\,t\nu} \Gamma^{[t]}_{\nu u}, \tag{7′}$$

wobei hier das Element ij der linken Seite dem Element rs, tu der rechten Seite entsprechen soll.

Demzufolge erhält man für jedes Element, deren die Matrix $\mathbf{U}$ gerade n^2 enthält, g Gleichungen, wenn n der Grad der reduziblen Darstellung Γ und g die Ordnung der Gruppe $\mathfrak{G}$ ist.

Aus diesen Gleichungen lassen sich die Elemente U_{ij} von $\mathbf{U}$ berechnen, wobei sich durch eine geschickte Wahl einzelner Matrizen $\boldsymbol{\Gamma}(G_l)$ aus der reduziblen Darstellung Γ das gestellte Problem oft stark vereinfachen lässt.

Der *Rockefeller Foundation* in New York danke ich für die Unterstützung der vorliegenden Arbeit, Herrn Dr. *R. Denss* für einen wertvollen Hinweis.

Zusammenfassung.

Es wird die in den Teilen I und II beschriebene Methode zur direkten einfachen Berechnung der richtigen Linearkombinationen von P-Funktionen zusammengefasst. Die für das Verfahren notwendigen Matrizen werden tabellarisch angegeben und ihre Berechnung erläutert.

Organisch-Chemisches Laboratorium
der Eidg. Technischen Hochschule, Zürich.