

Doppelnebenklassen als Klassenbegriff und Nomenklaturprinzip für Isomere und ihre Abzählung

ERNST RUCH, WERNER HÄSSELBARTH und BERND RICHTER

Institut für Quantenchemie der Freien Universität Berlin

Eingegangen am 20. August 1970

Double Cosets as Class Notation and Basis of Nomenclature and Their Enumeration

The general principle of classifying molecules of a common gross formula according to "configurations" is founded on the combination of two abstractions among rigid molecular models with a common molecular frame, numbered places for ligands, and numbered ligands. It is shown that the various points of view, which can be taken for the classification are determined by two accordingly chosen subgroups \mathfrak{A} and \mathfrak{B} of a permutation group \mathfrak{S} , the configurations being defined by the double cosets of the product $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$. Just as the irreducible representations of the symmetry group of an observable furnish the nomenclature for different types of eigenfunctions the double cosets here provide a nomenclature for the configurations. The special principle of classification is given by the choice of \mathfrak{A} , \mathfrak{B} and \mathfrak{S} . Thus, the enumeration of configuration leads to the generalised problem of enumerating double cosets. For this, three formulas are derived. In case of the special group $\mathfrak{S} = \mathfrak{S}_n$ G. Pólya found a formula of enumeration which is shown to reduce to our formulas in the appendix.

Das allgemeine Prinzip, Moleküle gleicher Bruttoformel nach „Konfigurationen“ zu klassifizieren, beruht auf der Kombination zweier Abstraktionsprozesse in der Menge starrer Molekülmodelle zu einem gemeinsamen Molekülgerüst mit bezifferten Plätzen für Liganden und bezifferten Liganden. Es wird gezeigt, daß die möglichen Klassifizierungsgesichtspunkte den möglichen Einteilungen von Permutationen einer Gruppe \mathfrak{S} in Doppelnebenklassen des Produkts zweier entsprechend ausgewählten Untergruppen \mathfrak{A} und \mathfrak{B} entsprechen. Ähnlich wie die irreduziblen Darstellungen der Symmetriegruppe einer Observablen die Nomenklatur für die Rassen der Eigenfunktion liefern, stellen die Doppelnebenklassen eine Nomenklatur für Konfigurationen. Das spezielle Klassifizierungsprinzip drückt sich in der Wahl der Gruppen \mathfrak{A} , \mathfrak{B} und \mathfrak{S} aus. Die Abzählung von Konfigurationen führt damit auf das verallgemeinerte Problem der Abzählung von Doppelnebenklassen. Dafür werden drei Formeln abgeleitet. Im Falle der speziellen Gruppe $\mathfrak{S} = \mathfrak{S}_n$ ist von G. Pólya eine Anzahlformel entwickelt worden, die im Anhang auf unsere Formeln zurückgeführt wird.

Les propriétés pseudoscalaires des molécules chirales sont l'objet d'une théorie algébrique après une définition convenable des classes de molécules. L'analyse du phénomène de chiralité sur ces classes conduit à des aspects particuliers de la théorie de la représentation des fonctions de chiralité, à une nouvelle structure de réseau des partitions, à des propriétés des groupes de permutation qui y sont liés et donne finalement un aperçu sur la structure des points de vue approchés pour les fonctions de chiralité. Ainsi le présent article contient des aspects purement mathématiques. Les théorèmes mathématiques qui seront énoncés et prouvés sans référence essentielle à la physique se trouveront dans l'appendice. L'article lui-même présente en premier lieu le phénomène physique; les concepts proposés par le formalisme mathématique tels que: ordre de chiralité, indice de chiralité, nombres de chiralité, complétude qualitative, hypothèse brève, partitions active et inactive des ligands, etc... donnent lieu à une systématisation et à une étude concernant la mesure des propriétés liées à la chiralité des molécules. Par exemple, les points de vue co- et contravariant pour le comportement des fonctions par transformation nous deux interprétations possibles des fonctions par transformation nous donne deux interprétations possibles des fonctions de chiralité. Nous pouvons considérer les composantes des fonctions appartenant à des représentations irréductibles comme des fonctions de chiralité pour des mélanges d'isomères. De là les opérateurs de projection sont dotés d'une inter-

prétation physique d'opérateurs d'ensemble pour les mélanges d'isomères. Le chapitre 10 esquisse des applications de la théorie de cet article. Les premières comparaisons convaincantes des données expérimentales pour le pouvoir rotatoire des dérivés alléniques avec les valeurs théoriques basées sur les approximations des méthodes présentées aux chapitres 8 et 10 sont disponibles et en voie de publication. Les conséquences mathématiques de la définition du réseau de partition donnée au chapitre 6 seront développées par ailleurs.

Problemstellung

Die Pólyasche Abzählmethode [4] gibt Antwort auf die Frage nach der Anzahl von substitutionsisomeren Molekülen mit teilweise gleichartigen Liganden. Wir nehmen das Abzählproblem zum Anlaß einer Analyse von Klassifizierungsprinzipien für Moleküle gleicher Bruttoformel und übersetzen die möglichen Standpunkte in einen algebraischen Sachverhalt, der einerseits den Klassifizierungsmodus und die naturgemäße Nomenklatur für die Klassen repräsentiert und sich andererseits dazu eignet, die Anzahl solcher Klassen in allgemeiner Form zu bestimmen. Die verwendete Terminologie ist von der Absicht bestimmt, ein algebraisches Problem zu formulieren, ohne die Konvention chemischer Begriffe zu verlassen.

Wir nennen eine räumliche Anordnung von endlich vielen Punkten ein Molekülgerüst und eine Bewertung der Punkte, d.h. eine Belegung der nummerierten Gerüstplätze mit nummerierten Objekten (Liganden) ein geordnetes Molekül. Mit fester Numerierung der Gerüstplätze gibt es demnach $n!$ verschiedene geordnete Moleküle der gleichen Bruttoformel entsprechend der Zahl der möglichen Verteilungen von n Objekten auf n Plätze. Moleküle bzw. Klassen von Molekülen entstehen aus einer Gesamtheit von geordneten Molekülen durch die Kombination zweier Abstraktionsprozesse, und zwar:

- a) Unter den Liganden gibt es solche gleicher Art oder solche, die wir aus Gründen einer chemischen, physikalischen oder formalen Ähnlichkeit nicht unterscheiden wollen, und wir nehmen Umordnungen solcher Liganden nicht zur Kenntnis. \mathfrak{B} sei die Gruppe aller Permutationen, die derartige Umordnungen hervorrufen.
- b) Es gibt Umbesetzungen am Gerüst, die wir unabhängig von der Natur der Liganden, die dabei umgeordnet werden, nicht zur Kenntnis nehmen wollen. Die Gruppe aller dieser Permutationen sei \mathfrak{A} .

Die Permutationen der Gruppen \mathfrak{A} und \mathfrak{B} bewirken Umordnungen der Liganden, aber die Permutationen aus \mathfrak{B} beziehen sich auf die Ligandenziffern, während diejenigen aus \mathfrak{A} auf die Gerüstziffern bezogen sind. Die Gruppe aller zulässigen Permutationen sei ebenfalls auf Gerüstziffern bezogen und soll mit \mathfrak{S} bezeichnet werden.

Die Permutationen aus den beiden Gruppen \mathfrak{A} und \mathfrak{B} bewirken an einem beliebigen geordneten Molekül alle jene Umordnungen von Liganden und nur solche, die wir definitionsgemäß nicht zur Kenntnis nehmen wollen. Damit ist die Menge aller geordneten Moleküle nach einem durch die spezielle Natur der Gruppen \mathfrak{A} und \mathfrak{B} vorgezeichneten Prinzip klassifizierbar. Wir nennen die entstandenen Klassen darauf bezugnehmend $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ -Konfigurationen. Die Erklärung für die Bezeichnung durch \mathfrak{B} statt \mathfrak{B} ergibt sich später.

Während die Gruppe \mathfrak{B} im allgemeinen durch die Partition der Ligandensorten bei gegebenem Ligandensortiment feststeht, drückt sich in der Wahl von \mathfrak{A} die Klassifizierungsabsicht aus.

Mit einer Gruppe \mathfrak{A} , deren Permutationen den Drehungen aus der Symmetriegruppe des Molekülgerüsts entsprechen, sind $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ -Konfigurationen Repräsentanten für starre Molekülmodelle von Isomeren. Es kann erwünscht sein, den Molekülbegriff unter Bezugnahme auf eine spezielle Meßtechnik zu erweitern, weil Umgruppierungen von Liganden an gewissen Gerüststellen, z.B. hervorgerufen durch gegenseitige Verdrehung von Gerüstteilen um σ -Bindungen, Austausch von Nachbarliganden, Pseudorotationen und dergleichen innerhalb der Meßzeit stattfinden und daher nur die Gesamtheiten durch solche Anordnungen verschiedener Exemplare zu beobachten sind. Unter Hinzunahme aller entsprechenden Permutationen in die Gruppe \mathfrak{A} haben wir dann $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ -Konfigurationen, die sich mit diesem Molekülbegriff decken. Schließlich mögen unabhängig von der Meßmethode Gründe systematischer Art vorliegen, Moleküle, die sich in gewissen Umordnungen der Liganden unterscheiden, per definitionem zu Klassen zusammenzufassen (Antipodenpaare mit achiralem Gerüst). Wie die Stereochemie zeigt, interessieren auch Konfigurationen aus einer Gesamtheit von Ligandenanordnungen, die sich nur durch zulässige Permutationen, also Permutationen mit Nebenbedingungen unterscheiden. In diesem Falle stehen die $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ -Konfigurationen innerhalb einer Gruppe $\mathfrak{S} \subset \mathfrak{S}_n$ zur Debatte, die wir [5, 6] als Gruppe konstitutionserhaltender Permutationen bezeichnet haben. Sie enthält neben starren Drehungen alle Umordnungen, die möglich sind, ohne die Topologie der Nachbarschaft zu zerstören.

Wir wollen zunächst die Pólyasche Abzählmethode referieren, mit der im Spezialfall $\mathfrak{S} = \mathfrak{S}_n$, die Anzahl der $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ -Konfigurationen ermittelt werden kann.

Pólyasche Abzählmethode

Die Bruttoformel der geordneten Moleküle zu einem Gerüst mit n Gerüststellen sei festgelegt durch eine Zerlegung $n_1, n_2 \dots n_\varrho$ von n^1 , wobei n_i die Zahl der Liganden von der Sorte i sei; ϱ bezeichnet also die Zahl der Sorten. Die Permutationen der Gruppe \mathfrak{A} seien als Produkte ziffernfremder Zyklen dargestellt, wobei alle nicht permutierten Ziffern durch Zyklen der Länge eins repräsentiert seien. Für eine Permutation σ mit $a_1(\sigma)$ Zyklen der Länge 1, $a_2(\sigma)$ Zyklen der Länge 2 und $a_n(\sigma)$ Zyklen der Länge n gilt:

$$n = \sum_{v=1}^n v a_v(\sigma)$$

mit Koeffizienten $a_v(\sigma)$, die für ein bestimmtes σ nicht alle von Null verschieden sein können.

Pólya ordnet gemäß Definition (1) jeder Permutation $\sigma \in \mathfrak{A}$ ein homogenes Polynom n -ten Grades in ϱ Variablen x_i mit $i = 1, 2 \dots \varrho$ zu

$$p_\sigma(x_1, \dots, x_\varrho) = \left\{ \sum_{i=1}^{\varrho} x_i \right\}^{a_1(\sigma)} \cdot \left\{ \sum_{i=1}^{\varrho} x_i^2 \right\}^{a_2(\sigma)} \cdot \dots \cdot \left\{ \sum_{i=1}^{\varrho} x_i^n \right\}^{a_n(\sigma)} \quad (1)$$

¹ Wir verstehen unter Zerlegung im Unterschied zu Partition eine Aufteilung der Zahl n gemäß $n = n_1 + n_2 + \dots + n_\varrho$ ohne Zusatzbedingung über abnehmende Beträge der n_i .

und bildet den Mittelwert dieser Polynome über der Gruppe \mathfrak{A} (ihre Ordnung sei mit $|\mathfrak{A}|$ bezeichnet)

$$\bar{p}(x_1, \dots, x_\varrho) = \frac{1}{|\mathfrak{A}|} \sum_{\sigma \in \mathfrak{A}} p_\sigma(x_1, \dots, x_\varrho).$$

Die Entwicklung von $\bar{p}(x_1, \dots, x_\varrho)$ nach Monomen $x_1^{n_1} x_2^{n_2} \dots x_\varrho^{n_\varrho}$ hat die Form

$$\bar{p}(x_1, \dots, x_\varrho) = \sum_{\sum n_i = n} a(n_1, \dots, n_\varrho) x_1^{n_1} x_2^{n_2} \dots x_\varrho^{n_\varrho}, \quad (2)$$

wobei die Summe über alle Verteilungen von n läuft.

Wie Pólya beweist, stimmen die Koeffizienten $a(n_1, \dots, n_\varrho)$ mit der Zahl $z(n_1, \dots, n_\varrho)$ der $\mathfrak{A}\mathfrak{B}(n_1, \dots, n_\varrho)$ -Konfigurationen überein, wenn mit $\mathfrak{B}(n_1, \dots, n_\varrho) = \mathfrak{S}_{n_1} \times \mathfrak{S}_{n_2} \times \dots \times \mathfrak{S}_{n_\varrho}$ die Gruppe aller Permutationen gleichwertiger Liganden zur Zerlegung $n_1, n_2, \dots, n_\varrho$ bezeichnet wird.

Als Beispiel für eine Anzahlbestimmung beantworten wir die Frage nach der Zahl chiraler und achiraler Moleküle ohne innere Beweglichkeiten in einer chiralen Molekülklasse mit achiralem Gerüst. Dabei seien alle Ligandensortimente zugelassen, die sich aus Liganden von $\varrho \leq n$ vorgegebenen Arten kombinieren lassen. Dazu gehören also unter anderem z.B. ϱ achirale Moleküle mit Liganden einer einzigen Sorte.

Beispiele für die Abzählung

Die Symmetriegruppe \mathfrak{G} eines achiralen Gerüsts enthält Spiegelungsoperationen und kann [7] homomorph auf repräsentative Permutationen einer Gruppe \mathfrak{A}_1 mit einer Untergruppe \mathfrak{A}_2 vom Index zwei in \mathfrak{A}_1 abgebildet werden, so daß alle Permutationen von \mathfrak{A}_2 den reinen Drehungen aus \mathfrak{G} entsprechen.

Mit den Permutationsgruppen \mathfrak{A}_1 und \mathfrak{A}_2 erhalten wir nach den eingangs angestellten Betrachtungen folgende Klasseneinteilungen:

$\mathfrak{A}_2\mathfrak{B}(n_1, \dots, n_\varrho)$ -Konfigurationen repräsentieren Moleküle für ein Ligandensortiment mit $n_1, n_2, \dots, n_\varrho$ jeweils gleichartigen Liganden,

$\mathfrak{A}_1\mathfrak{B}(n_1, \dots, n_\varrho)$ -Konfigurationen repräsentieren achirale Moleküle und Antipodenpaare für ein Ligandensortiment mit $n_1, n_2, \dots, n_\varrho$ jeweils gleichartigen Liganden.

Mit der Bezeichnung $z_1(n_1, \dots, n_\varrho)$ und $z_2(n_1, \dots, n_\varrho)$ für die Zahl der jeweiligen Konfigurationen zu einer gegebenen Zerlegung von n ergibt sich demnach

$$\begin{aligned} z_1(n_1, \dots, n_\varrho) &= z_a(n_1, \dots, n_\varrho) + 2 z_p(n_1, \dots, n_\varrho), \\ z_2(n_1, \dots, n_\varrho) &= z_a(n_1, \dots, n_\varrho) + z_p(n_1, \dots, n_\varrho), \end{aligned}$$

wobei $z_a(n_1, \dots, n_\varrho)$ die Zahl der achiralen Moleküle und $z_p(n_1, \dots, n_\varrho)$ die Zahl der chiralen Antipodenpaare sind. Wir erhalten durch Summation über alle Zerlegungen von n in höchstens ϱ von Null verschiedene Zahlen und Auflösen nach $z_a(\varrho)$ und $z_p(\varrho)$, den Zahlen der achiralen Moleküle und der chiralen Antipodenpaare für alle möglichen Ligandensortimente aus höchstens ϱ verschiedenen vor-

gegebenen Ligandenarten

$$z_a(\varrho) = 2 \sum_{\Sigma n_i = n} z_2(n_1, \dots, n_\varrho) - \sum_{\Sigma n_i = n} z_1(n_1, \dots, n_\varrho),$$

$$z_p(\varrho) = \sum_{\Sigma n_i = n} z_1(n_1, \dots, n_\varrho) - \sum_{\Sigma n_i = n} z_2(n_1, \dots, n_\varrho).$$

$z_1(n_1, \dots, n_\varrho)$ und $z_2(n_1, \dots, n_\varrho)$ sind aber gerade die Koeffizienten in (2) wenn $\mathfrak{A} = \mathfrak{A}_1$ bzw. $\mathfrak{A} = \mathfrak{A}_2$ gesetzt wird.

Wie unzureichend die Anschauung für eine Schätzung ist, sollen einige Zahlen zeigen, die gleichzeitig die Leistungsfähigkeit der Methode illustrieren.

1. Gerüstsymmetrie C_{2v} , acht Gerüstplätze gemäß Fig. 1 (z.B. Adamantanonderivate, bei denen alle in Spiegelebenen des Adamantans gelegenen Gerüststellen mit Wasserstoff besetzt sind).

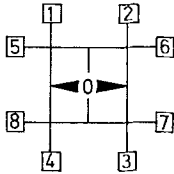


Fig. 1

ϱ	2	4
$z_a(\varrho)$	16	256
$z_p(\varrho)$	60	16 320

2. Gerüstsymmetrie O_h , sechs Gerüstplätze an den Ecken eines Oktaeders.

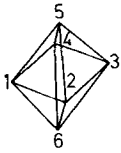


Fig. 2

ϱ	2	3	4	5	6
$z_a(\varrho)$	10	55	200	560	1316
$z_p(\varrho)$	0	1	20	120	455

3. Adamantanonderivate mit 14 Gerüstplätzen.

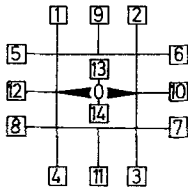


Fig. 3

ϱ	2	14
$z_a(\varrho)$	384	11 068 417 920
$z_p(\varrho)$	3936	2 777 996 198 533 920

AB-Konfigurationen und Doppelnebenklassen

Die Klassifizierung in AB-Konfigurationen mit der eingangs festgelegten Bedeutung von \mathfrak{A} und \mathfrak{B} ist zwar eindeutig definiert, aber eine systematische Übersicht über die Klassen, ihre Repräsentation und ihre Abzählung innerhalb einer nicht notwendig symmetrischen Permutationsgruppe macht es erforderlich,

beide Gruppen mit Untergruppen \mathfrak{A} , \mathfrak{B} derselben Permutationsgruppe \mathfrak{S} oder \mathfrak{S}_n in Zusammenhang zu bringen.

Wir unterscheiden daher zunächst Operatoren σ und $\circ(\sigma)$, die in verschiedener Weise auf geordnete Moleküle wirken. Die Operatoren σ aus \mathfrak{S} seien so definiert, wie es der Verabredung über die Permutationen aus \mathfrak{A} entspricht. Sie beinhalten also eine Permutationsvorschrift über Umordnungen bezüglich Gerüstplätzen. \mathfrak{A} sei Untergruppe von \mathfrak{S} und \mathfrak{S} enthalte alle Permutationen innerhalb einer Gesamtheit von geordneten Molekülen, die wir unabhängig vom Ligandensortiment als mögliche Modelle für unsere Molekülklasse akzeptieren wollen (z.B. Stereoisomere). Wir wählen wie in [8] ein geordnetes Standardmolekül L , in dem Gerüst- und Ligandenziffern übereinstimmen, und bezeichnen mit σL ein geordnetes Molekül, das durch die Permutation σ aus L entsteht. Es gelte:

$$\sigma_1(\sigma_2 L) = (\sigma_1 \sigma_2) L$$

wobei unter L auch eine Spaltenmatrix von Ligandensymbolen l_i mit $i = 1, \dots, n$ verstanden werden kann

$$L \equiv \begin{pmatrix} l_1 \\ l_2 \\ \vdots \\ l_n \end{pmatrix}.$$

In diesem Falle entsteht das Resultat der Anwendung einer Operation σ durch Linksmultiplikation von L mit einer Matrix $D(\sigma)$. Dabei entsprechen die Zeilenziffern der Spaltenmatrix L den Nummern der Gerüstplätze. Alle geordneten Moleküle, die wir deswegen nicht unterscheiden wollen, weil sie durch Permutationen von \mathfrak{A} auseinander hervorgehen, konstituieren Mengen $\mathfrak{A}_{\sigma_i} L$, die sich aus einem geordneten Molekül $\sigma_i L$ der jeweiligen Menge durch Anwendung aller Operatoren $\sigma \in \mathfrak{A}$ ergeben. Die Operatoren aus $\overline{\mathfrak{B}}$ können wir, da sie sich auf Ligandenziffern beziehen sollen, als Permutationsvorschriften über die Umbelegung von Gerüstplätzen bezüglich bezifferter Liganden verstehen. Also beispielsweise:

(123) bedeute: Ersetze Ligand an Platz 1 durch Ligand an Platz 2, Ligand an Platz 2 durch Ligand an Platz 3, Ligand an Platz 3 durch Ligand an Platz 1.

$\circ((123))$ bedeute: Ersetze Platz für Ligand 1 durch Platz für Ligand 2, Platz für Ligand 2 durch Platz für Ligand 3, Platz für Ligand 3 durch Platz für Ligand 1.

Damit sind auch die Permutationen aus $\overline{\mathfrak{B}}$ als Operatoren auf geordnete Moleküle erklärt, und wir finden, daß Operatoren aus \mathfrak{A} und $\overline{\mathfrak{B}}$ vertauschbar sind

$$\circ(\ell) \sigma L = \sigma \circ(\ell) L,$$

denn die Gleichung

$$\sigma \circ(\ell) \sigma^{-1} L = \circ(\ell) L$$

repräsentiert den evidenten Befund, daß eine Permutation bezüglich der Ligandenziffern unabhängig davon, an welcher Stelle sich die Liganden befinden, dieselbe bleibt.

Da sich aber eine Operation aus $\bar{\mathfrak{B}}$ am geordneten Molekül L mit übereinstimmender Gerüst- und Ligandenbezeichnung als inverse Permutation aus \mathfrak{S} interpretieren läßt, falls in \mathfrak{S} eine solche Permutation existiert, folgt mit der Definition

$$\sigma(\sigma^{-1})L = \sigma L$$

wegen

$$\sigma(\tau^{-1})\sigma(\sigma^{-1})L = \sigma(\tau^{-1})\sigma L = \sigma\sigma(\tau^{-1})L = \sigma\tau L,$$

daß mit der invers isomorphen Abbildung $\sigma(\sigma^{-1}) \leftrightarrow \sigma$ von Gruppen $\bar{\mathfrak{B}}$ und $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{S}$ die Menge \mathfrak{M}_1 aller geordneten Moleküle, die $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ -Konfiguration, zu der L gehört, entsprechend der Gleichung

$$\mathfrak{M}_1 = \bar{\mathfrak{B}}\mathfrak{A}L = \mathfrak{A}\bar{\mathfrak{B}}L = \mathfrak{A}\mathfrak{B}L,$$

durch die Anwendung aller Operatoren der Form $\sigma\tau$ mit $\sigma \in \mathfrak{A}$, $\tau \in \mathfrak{B}$ auf L entsteht. Der Komplex $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$, das Untergruppenprodukt von \mathfrak{A} und \mathfrak{B} , ist im allgemeinen keine Gruppe, und es gilt im allgemeinen $\mathfrak{A}\mathfrak{B} \neq \mathfrak{B}\mathfrak{A}$.

Die analoge Betrachtung für die Menge \mathfrak{M}_i aller geordneten Moleküle, mit denen zusammen $\sigma_i L$ eine $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ -Konfiguration bildet, führt auf die Gleichung

$$\mathfrak{M}_i = \bar{\mathfrak{B}}\mathfrak{A}_{\sigma_i}L = \mathfrak{A}_{\sigma_i}\bar{\mathfrak{B}}L = \mathfrak{A}_{\sigma_i}\mathfrak{B}L.$$

Alle geordneten Moleküle einer $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ -Konfiguration, zu der $\sigma_i L$ gehört, entstehen also aus L durch Anwendung von Operatoren der Form $\sigma\sigma_i\tau$ mit $\sigma \in \mathfrak{A}$ und $\tau \in \mathfrak{B}$.

Falls die Gruppe \mathfrak{S} die Vereinigungsgruppe $\mathfrak{A} \cup \mathfrak{B}$ nicht enthält, muß \mathfrak{B} auf solche Permutationen gleichartiger Liganden beschränkt werden, die im Sinne von \mathfrak{S} zulässig sind, statt \mathfrak{B} ist also die Gruppe $\mathfrak{B}' = \mathfrak{S} \cap \mathfrak{B}$ zu verwenden. Anderenfalls kann das Klassifikationsproblem nicht gestellt werden.

Nach allgemeinen Sätzen über die Zerlegung einer endlichen Gruppe in Doppelnebenklassen zum Produkt zweier Untergruppen \mathfrak{A} und \mathfrak{B} gibt es immer ein Repräsentantensystem von Gruppenelementen $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_z$, so daß für die Gruppe \mathfrak{S} eine disjunkte Zerlegung existiert von der Form

$$\mathfrak{S} = \bigcup_{i=1}^z \mathfrak{A}_{\sigma_i}\mathfrak{B} \quad \text{mit } (\mathfrak{A}_{\sigma_i}\mathfrak{B}) \cap (\mathfrak{A}_{\sigma_k}\mathfrak{B}) = \text{leere Menge für alle } i \neq k \text{ eines Repräsentantensystems.}$$

Da unsere Gruppe \mathfrak{S} alle Permutationen umfaßt, die von L auf alle geordneten Moleküle jener Gesamtheit \mathfrak{M} führen, innerhalb der wir klassifizieren wollen, haben wir also gemäß:

$$\mathfrak{M} = \bigcup_{i=1}^z \mathfrak{M}_i = \bigcup_{i=1}^z \mathfrak{A}_{\sigma_i}\mathfrak{B}L$$

eine Einteilung von \mathfrak{M} in Konfigurationen \mathfrak{M}_i , die unter Bezugnahme auf ein Standardisomeres L durch die Doppelnebenklassen $\mathfrak{A}_{\sigma_i}\mathfrak{B}$ gekennzeichnet sind. Dabei ist das Repräsentantensystem mit $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_z$ bis auf einen Linksfaktor aus \mathfrak{A} und einen Rechtsfaktor aus \mathfrak{B} festgelegt, d.h. zwei Permutationen σ_i und σ'_i sind als Repräsentanten einer Doppelnebenklasse äquivalent, wenn sie in der Beziehung $\sigma\sigma_i\tau = \sigma'_i$ mit $\sigma \in \mathfrak{A}$, $\tau \in \mathfrak{B}$ stehen.

Die Doppelnebenklassen bzw. ein nach willkürlichen oder physikalisch nahegelegten Prinzipien vorgegebenes Repräsentantensystem für Doppelnebenklassen liefern damit eine Nomenklatur für $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ -Konfigurationen. Die Abzählung von $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ -Konfigurationen ist auf die Abzählung der Doppelnebenklassen zweier Untergruppen in einer Gruppe \mathfrak{S} zurückgeführt.

Dem allgemeinem Problem der Abzählung wollen wir uns jetzt zuwenden und verzichten daher im folgenden auf die spezielle Interpretation der Gruppen \mathfrak{A} , \mathfrak{B} und \mathfrak{S} als Permutationsgruppen.

Theoreme über die Anzahl von Doppelnebenklassen

Es sei vorweg bemerkt, daß die folgenden Überlegungen in erster Linie dem Zweck allgemeiner Aussagen über die Anzahl von Doppelnebenklassen dienen und die Frage der praktischen Verwertbarkeit diesbezüglicher Formeln zur Anzahlbestimmung nicht diskutiert wird.

\mathfrak{A} und \mathfrak{B} seien Untergruppen einer endlichen Gruppe \mathfrak{S} mit Elementen g . Aus einer Zerlegung von \mathfrak{S} in Doppelnebenklassen des Untergruppenproduktes $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ mit dem Repräsentantensystem $g_1 = e, g_2, \dots, g_z$ wird gemäß

$$\mathfrak{S} = \bigcup_{i=1}^z \mathfrak{A}g_i\mathfrak{B} = \bigcup_{i=1}^z \mathfrak{B}g_i^{-1}\mathfrak{A}$$

eine Zerlegung in Doppelnebenklassen von $\mathfrak{B}\mathfrak{A}$ mit dem Repräsentantensystem $g_1^{-1} = e, g_2^{-1}, \dots, g_z^{-1}$. Die Zahl der Doppelnebenklassen von $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ und $\mathfrak{B}\mathfrak{A}$ in \mathfrak{S} ist also dieselbe.

Um einen expliziten Ausdruck für z zu erhalten, überzeugen wir uns von der Gültigkeit der Gleichung:

$$\sum_{g \in \mathfrak{A}g\mathfrak{B}} \frac{1}{|\mathfrak{A}g\mathfrak{B}|} = 1 \quad \text{für beliebige Elemente } g_i \in \mathfrak{S}^2$$

und machen Gebrauch von der bekannten Beziehung

$$|\mathfrak{A}g\mathfrak{B}| = \frac{|\mathfrak{A}||\mathfrak{B}|}{|g^{-1}\mathfrak{A}g \cap \mathfrak{B}|} = \frac{|\mathfrak{A}||\mathfrak{B}|}{|\mathfrak{A} \cap g\mathfrak{B}g^{-1}|} \quad \text{gültig für alle } g \in \mathfrak{S}.$$

Damit ergibt sich eine Anzahlformel für Doppelnebenklassen

$$z = \sum_{g \in \mathfrak{S}} \frac{1}{|\mathfrak{A}g\mathfrak{B}|} = \frac{1}{|\mathfrak{A}||\mathfrak{B}|} \sum_{g \in \mathfrak{S}} |g^{-1}\mathfrak{A}g \cap \mathfrak{B}| = \frac{1}{|\mathfrak{A}||\mathfrak{B}|} \sum_{g \in \mathfrak{S}} |\mathfrak{A} \cap g\mathfrak{B}g^{-1}|. \quad (3)$$

Gl. (3) wird besonders einfach, wenn eine der beiden Untergruppen Normalteiler ist. Dann läßt sich nämlich die Summation allgemein ausführen, und es ergibt sich:

$$z = \frac{|\mathfrak{S}||\mathfrak{A} \cap \mathfrak{B}|}{|\mathfrak{A}||\mathfrak{B}|} \quad \text{gültig wenn } \mathfrak{A} \text{ oder } \mathfrak{B} \text{ Normalteiler ist.}$$

Für die Herleitung von zwei weiteren Anzahlformeln benötigen wir das Reziprozitätstheorem von Frobenius und das Mackeysche Untergruppentheorem

² Durch die Absolutstriche sei die Ordnung der jeweiligen Menge bezeichnet.

[1, 3]. Wir formulieren die beiden Sätze für einen hier benötigten Spezialfall und benutzen dabei die folgenden Notation:

- $[\gamma(\mathfrak{U})]_{\mathfrak{G}}$ bezeichne die Induktion³ der Darstellung γ einer Untergruppe \mathfrak{U} nach der Obergruppe \mathfrak{G} ,
 $\{\gamma(\mathfrak{G})\}_{\mathfrak{U}}$ bezeichne die Subduktion der Darstellung γ einer Obergruppe \mathfrak{G} nach der Untergruppe \mathfrak{U} ,
 $|\gamma(\mathfrak{G}) \subset \gamma'(\mathfrak{G})|$ sei die Zahl, die angibt, wie oft die Darstellung $\gamma(\mathfrak{G})$ in der Darstellung $\gamma'(\mathfrak{G})$ enthalten ist,
 $\gamma_1(\mathfrak{G})$ bezeichne die Einheitsdarstellung der Gruppe \mathfrak{G} .

Die beiden Theoreme lassen sich damit bei der erwähnten Spezialisierung in der vereinfachten Form (4) und (5) schreiben. Das Mackeysche Untergruppentheorem lautet:

$$\{[\gamma_1(\mathfrak{B})]_{\mathfrak{A}}\}^{\mathfrak{G}} = \sum_{i=1}^z [\gamma_1(\mathfrak{A} \cap \mathfrak{g}_i \mathfrak{B} \mathfrak{g}_i^{-1})]_{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{G}} \quad (4)$$

mit \mathfrak{g}_i als Repräsentantensystem der Doppelnebenklassen zu $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$.

In Worten:

Die identische Darstellung einer Untergruppe $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{S}$, induziert nach \mathfrak{S} und dann subduziert nach $\mathfrak{A} \subset \mathfrak{S}$, entspricht einer Induktion mit den identischen Darstellungen aller Durchschnitte $\mathfrak{A} \cap \mathfrak{g}_i \mathfrak{B} \mathfrak{g}_i^{-1}$ nach \mathfrak{A} , wobei die \mathfrak{g}_i ein Repräsentantensystem der Doppelnebenklassen zum Untergruppenprodukt $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ sind.

Das Reziprozitätstheorem von Frobenius lautet für unseren Spezialfall:

$$|\gamma_1(\mathfrak{A}) \subset \{I_r(\mathfrak{S})\}_{\mathfrak{A}}| = |I_r(\mathfrak{S}) \subset [\gamma_1(\mathfrak{A})]_{\mathfrak{S}}^{\mathfrak{G}}| \quad (5)$$

gültig für alle irreduziblen Darstellungen $I_r(\mathfrak{S})$.

In Worten:

Die identische Darstellung einer Untergruppe \mathfrak{A} kommt in einer irreduziblen Darstellung $I_r(\mathfrak{S})$ von \mathfrak{S} ebensooft vor, wie die irreduzible Darstellung $I_r(\mathfrak{S})$ in der Darstellung von \mathfrak{S} auftritt, welche mit der identischen von \mathfrak{A} induziert wird.

Wir verwenden (4) und (5) abwechselnd in verschiedener Interpretation. Zunächst setzen wir in (4) \mathfrak{A} statt \mathfrak{S} , $\mathfrak{A} \cap \mathfrak{g} \mathfrak{B} \mathfrak{g}^{-1}$ statt \mathfrak{A} und die identische Darstellung $\gamma_1(\mathfrak{A})$ statt $I_r(\mathfrak{S})$. Damit wird die linke Seite von (5) offensichtlich eins, und wir haben:

$$1 = |\gamma_1(\mathfrak{A}) \subset [\gamma_1(\mathfrak{A} \cap \mathfrak{g} \mathfrak{B} \mathfrak{g}^{-1})]_{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{G}}| \quad \text{gültig für alle } \mathfrak{g} \in \mathfrak{S}.$$

Für ein Repräsentantensystem \mathfrak{g}_i der Doppelnebenklassen von $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ folgt daraus sofort:

$$z = \left| \gamma_1(\mathfrak{A}) \subset \sum_{i=1}^z [\gamma_1(\mathfrak{A} \cap \mathfrak{g}_i \mathfrak{B} \mathfrak{g}_i^{-1})]_{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{G}} \right|.$$

³ In dieser Arbeit wird unter „Induktion“ immer „reguläre Induktion“ verstanden (vgl. [9]).

Unter Ausnutzung der symmetrischen Abhängigkeit der Zahl z von \mathfrak{A} und \mathfrak{B} ergibt sich wegen (4)

$$z = |\gamma_1(\mathfrak{A}) \subset \{[\gamma_1(\mathfrak{B})]^\mathfrak{S}\}_{\mathfrak{A}}| = |\gamma_1(\mathfrak{B}) \subset \{[\gamma_1(\mathfrak{A})]^\mathfrak{S}\}_{\mathfrak{B}}|.$$

Wir zerlegen in diesem Ausdruck die nach \mathfrak{S} induzierte Darstellung in ihre irreduziblen Bestandteile gemäß

$$[\gamma_1(\mathfrak{A})]^\mathfrak{S} = \sum_{r=1}^k z_r(\mathfrak{A}) \Gamma_r(\mathfrak{S}) \quad \text{bzw.} \quad [\gamma_1(\mathfrak{B})]^\mathfrak{S} = \sum_{r=1}^k z_r(\mathfrak{B}) \Gamma_r(\mathfrak{S}),$$

wobei $z_r(\mathfrak{A})$ bzw. $z_r(\mathfrak{B})$ angibt, wie oft die irreduzible Darstellung $\Gamma_r(\mathfrak{S})$ in der von $\gamma_1(\mathfrak{A})$ bzw. $\gamma_1(\mathfrak{B})$ induzierten vorkommt. Unter Benutzung von Gleichung (5), die in der aufgeschriebenen Form gerade die Bedeutung von $z_r(\mathfrak{A})$ hat, erhalten wir dann das Resultat

$$z = \sum_{r=1}^k z_r(\mathfrak{A}) z_r(\mathfrak{B}), \tag{6}$$

dabei wird über alle irreduziblen Darstellungen Γ_r von \mathfrak{S} summiert, und $z_r(\mathfrak{A})$ bzw. $z_r(\mathfrak{B})$ geben an, wie oft $\gamma_1(\mathfrak{A})$ bzw. $\gamma_1(\mathfrak{B})$ in $\Gamma_r(\mathfrak{S})$ enthalten ist.

Wir finden eine weitere Formel für z , wenn wir nochmals von der vorletzten Gleichung für z ausgehen und mit Hilfe der Charakterenrelationen bestimmen, wie oft $\gamma_1(\mathfrak{A})$ in $\{[\gamma_1(\mathfrak{B})]^\mathfrak{S}\}_{\mathfrak{A}}$ enthalten ist.

Auf diese Weise ergibt sich:

$$z = |\gamma_1(\mathfrak{A}) \subset \{[\gamma_1(\mathfrak{B})]^\mathfrak{S}\}_{\mathfrak{A}}| = \frac{1}{|\mathfrak{A}|} \sum_{\mathfrak{g} \in \mathfrak{A}} \chi_1^{[\mathfrak{B}]^\mathfrak{S}}(\mathfrak{g}) \chi_1^{\mathfrak{A}}(\mathfrak{g}^{-1}) = \frac{1}{|\mathfrak{A}|} \sum_{r=1}^k |\mathfrak{C}_r \cap \mathfrak{A}| \chi_1^{[\mathfrak{B}]^\mathfrak{S}}(\mathfrak{g}_r)$$

Dabei ist $\chi_1^{[\mathfrak{B}]^\mathfrak{S}}$ der Charakter zur Darstellung $[\gamma_1(\mathfrak{B})]^\mathfrak{S}$, $\chi_1^{\mathfrak{A}}$ der Charakter zur Darstellung $\gamma_1(\mathfrak{A})$, die \mathfrak{C}_r mit $r=1, \dots, k$ sind die Klassen konjugierter Elemente von \mathfrak{S} , die \mathfrak{g}_r ein Repräsentantensystem dieser Klassen.

Man kennt (vgl. [2]) für den Charakter von $[\gamma_1(\mathfrak{B})]^\mathfrak{S}$ die Beziehung

$$\chi_1^{[\mathfrak{B}]^\mathfrak{S}}(\mathfrak{g}_r) = \frac{|\mathfrak{S}| |\mathfrak{B} \cap \mathfrak{C}_r|}{|\mathfrak{B}| |\mathfrak{C}_r|}.$$

Durch Einsetzen in den vorangehenden Ausdruck erhält man damit die Form:

$$z = \frac{|\mathfrak{S}|}{|\mathfrak{A}| |\mathfrak{B}|} \sum_{r=1}^k \frac{|\mathfrak{A} \cap \mathfrak{C}_r| |\mathfrak{B} \cap \mathfrak{C}_r|}{|\mathfrak{C}_r|}, \tag{7}$$

wobei über die Klassen konjugierter Elemente summiert wird.

Zusammenfassend stellen wir fest:

Die Anzahl von Doppelnebenklassen ist durch (3) und (7) auf Eigenheiten der Gruppenstruktur, durch (6) auf Eigenschaften der irreduziblen Darstellungen zurückgeführt. Alle diese Gleichungen bestimmen die Anzahl von $\mathfrak{A}\mathfrak{B}$ - oder $\mathfrak{B}\mathfrak{A}$ -Konfigurationen in einer Menge, wenn \mathfrak{A} , \mathfrak{B} und \mathfrak{S} entsprechend als Permutationsgruppen interpretiert werden. Insoweit die praktische Anzahlbestimmung nach (3), (7) oder (6) zu schwerfällig wird, können aus diesen Beziehungen numerische Methoden für Gruppen spezieller Struktur abgeleitet werden. Für die Gruppen $\mathfrak{S} = \mathfrak{S}_n$ beinhaltet die Pólyasche Abzählformel eine solche Methode. Ihre Äquivalenz zu unseren Formeln wird im Anhang explizit nachgewiesen.

Anhang

Der Vergleich mit der Pólyaschen Abzählformel ist nur möglich unter der Voraussetzung $\mathfrak{S} = \mathfrak{S}_n$. Wir übernehmen die Polynome (1) des Polyaschen Ansatzes, ersetzen dort das Argument σ durch r und verstehen darunter eine Bezeichnung für die Klasse \mathfrak{C}_r konjugierter Permutationen. Da sie alle dieselbe Zyklenstruktur haben, ist das zulässig.

$$p_r(x_1, \dots, x_\varrho) = \left\{ \sum_{i=1}^{\varrho} x_i \right\}^{a_1(r)} \cdot \left\{ \sum_{i=1}^{\varrho} x_i^2 \right\}^{a_2(r)} \cdots \left\{ \sum_{i=1}^{\varrho} x_i^n \right\}^{a_n(r)}$$

Damit läßt sich das über die Gruppe \mathfrak{A} gemittelte Polynom $\bar{p}(x_1, \dots, x_\varrho)$ in der Form schreiben

$$\bar{p}(x_1, \dots, x_\varrho) = \frac{1}{|\mathfrak{A}|} \sum_{r=1}^k |\mathfrak{C}_r \cap \mathfrak{A}| p_r(x_1, \dots, x_\varrho),$$

wobei der Index r alle Klassen der Gruppe \mathfrak{S}_n durchläuft.

Mit der Entwicklung von $p_r(x_1, \dots, x_\varrho)$ in Monome

$$p_r(x_1, \dots, x_\varrho) = \sum b_r(n_1, \dots, n_\varrho) x_1^{n_1} x_2^{n_2} \cdots x_\varrho^{n_\varrho}$$

würde unter Bezugnahme auf Formel (7) die Gleichung

$$\begin{aligned} z(n_1, \dots, n_\varrho) &= \frac{|\mathfrak{S}_n|}{|\mathfrak{A}| |\mathfrak{B}(n_1, \dots, n_\varrho)|} \sum_{r=1}^k \frac{|\mathfrak{A} \cap \mathfrak{C}_r| |\mathfrak{B}(n_1, \dots, n_\varrho) \cap \mathfrak{C}_r|}{|\mathfrak{C}_r|} \\ &= \frac{1}{|\mathfrak{A}|} \sum_{r=1}^k |\mathfrak{A} \cap \mathfrak{C}_r| b_r(n_1, \dots, n_\varrho) = a(n_1, \dots, n_\varrho) \end{aligned}$$

die Übereinstimmung der beiden Abzählformeln beweisen.

Hinreichend dafür ist der Beweis folgender Gleichung

$$b_r(n_1, \dots, n_\varrho) = \frac{|\mathfrak{S}_n| |\mathfrak{B}(n_1, \dots, n_\varrho) \cap \mathfrak{C}_r|}{|\mathfrak{C}_r| |\mathfrak{B}(n_1, \dots, n_\varrho)|} \tag{8}$$

Beweis von Gl. (8):

α) Wir untersuchen die linke Seite der Gl. (8):

Die Entwicklung eines Faktors aus der Produktform von $p_r(x_1, \dots, x_\varrho)$ in Monome lautet:

$$\left\{ \sum_{i=1}^{\varrho} x_i^t \right\}^{a_t(r)} = \sum \frac{a_t(r)!}{v_1^{(t)}(r)! v_2^{(t)}(r)! \cdots v_\varrho^{(t)}(r)!} x_1^{t v_1^{(t)}(r)} x_2^{t v_2^{(t)}(r)} \cdots x_\varrho^{t v_\varrho^{(t)}(r)},$$

dabei läuft die Summe über alle Zerlegungen $\sum_{i=1}^{\varrho} v_i^{(t)}(r) = a_t(r)$.

Für $p_r(x_1, \dots, x_\varrho)$ gilt also

$$p_r(x_1, \dots, x_\varrho) = \sum \left[\prod_{t=1}^n \frac{a_t(r)!}{v_1^{(t)}(r)! v_2^{(t)}(r)! \cdots v_\varrho^{(t)}(r)!} \right] x_1^{\sum_{t=1}^n t v_1^{(t)}(r)} \cdot x_2^{\sum_{t=1}^n t v_2^{(t)}(r)} \cdots x_\varrho^{\sum_{t=1}^n t v_\varrho^{(t)}(r)};$$

hier läuft die Summe über alle Zerlegungen $\sum_{i=1}^{\varrho} v_i^{(t)}(r) = a_t(r)$ für jedes $t = 1, \dots, n$, und daher gilt für die Koeffizienten

$$b_r(n_1, \dots, n_{\varrho}) = \sum \prod_{i=1}^n \frac{a_i(r)!}{v_1^{(i)}(r)! v_2^{(i)}(r)! \dots v_{\varrho}^{(i)}(r)!}, \quad (8a)$$

wobei sich die Summe über alle Zerlegungen $\sum_{i=1}^{\varrho} v_i^{(t)}(r) = a_t(r)$ für jedes $t = 1, \dots, n$ mit der Nebenbedingung $\sum_{i=1}^n t v_i^{(t)}(r) = n_i$ für $i = 1, \dots, \varrho$ erstreckt.

β) Wir untersuchen die rechte Seite von Gl. (8):

Die Ordnung einer Klasse konjugierter Elemente in der \mathfrak{S}_{n_i} mit der Zyklenstruktur: $\tau_1^{(i)}$ Zyklen der Länge 1, $\tau_2^{(i)}$ Zyklen der Länge 2, $\tau_{n_i}^{(i)}$ Zyklen der Länge n_i , Zahlen $\tau_t^{(i)}$ für die also gilt $\sum_{t=1}^{n_i} t \tau_t^{(i)} = n_i$, ist gegeben durch

$$\frac{n_i!}{1^{\tau_1^{(i)}} \tau_1^{(i)}! 2^{\tau_2^{(i)}} \tau_2^{(i)}! \dots n_i^{\tau_{n_i}^{(i)}} \tau_{n_i}^{(i)}!}.$$

Mit einer Erweiterung des Definitionsbereiches für die $\tau_t^{(i)}$ durch die Festsetzung $\tau_t^{(i)} = 0$ für $t = n_i + 1, \dots, n$ können wir schreiben

$$\frac{n_i!}{1^{\tau_1^{(i)}} \tau_1^{(i)}! 2^{\tau_2^{(i)}} \tau_2^{(i)}! \dots n^{\tau_{n_i}^{(i)}} \tau_{n_i}^{(i)}!}.$$

Damit erhalten wir die Ordnung des Durchschnitts $\mathfrak{C}_r \cap \mathfrak{B}(n_1, \dots, n_{\varrho})$

$$|\mathfrak{C}_r \cap \mathfrak{B}(n_1, \dots, n_{\varrho})| = \sum \prod_{i=1}^{\varrho} \frac{n_i!}{1^{\tau_1^{(i)}} \tau_1^{(i)}! 2^{\tau_2^{(i)}} \tau_2^{(i)}! \dots n^{\tau_{n_i}^{(i)}} \tau_{n_i}^{(i)}!}.$$

Die Summe läuft dabei über alle $\tau_t^{(i)}$ mit $t = 1, \dots, n$ und $i = 1, \dots, \varrho$, die die Bedingungen $\sum_{i=1}^{\varrho} \tau_t^{(i)} = a_t(r)$ für alle $t = 1, \dots, n$ und $\sum_{t=1}^n t \tau_t^{(i)} = n_i$ mit $i = 1, \dots, \varrho$ erfüllen.

Dieser Ausdruck läßt sich vereinfachen

$$|\mathfrak{C}_r \cap \mathfrak{B}(n_1, \dots, n_{\varrho})| = \frac{n_1! n_2! \dots n_{\varrho}!}{1^{a_1(r)} 2^{a_2(r)} \dots n^{a_n(r)}} \sum \prod_{i=1}^{\varrho} \frac{1}{\tau_1^{(i)}! \tau_2^{(i)}! \dots \tau_{n_i}^{(i)}!}.$$

Mit der Ordnung der Klasse \mathfrak{C}_r :

$$|\mathfrak{C}_r| = \frac{n!}{1^{a_1(r)} a_1(r)! 2^{a_2(r)} a_2(r)! \dots n^{a_n(r)} a_n(r)!}$$

ergibt sich schließlich

$$\begin{aligned} \frac{|\mathfrak{S}_n| |\mathfrak{C}_r \cap \mathfrak{B}(n_1, \dots, n_{\varrho})|}{|\mathfrak{C}_r| |\mathfrak{B}(n_1, \dots, n_{\varrho})|} &= \sum \frac{a_1(r)! a_2(r)! \dots a_n(r)!}{\tau_1^{(1)}! \tau_2^{(1)}! \dots \tau_n^{(1)}! \dots \tau_1^{(\varrho)}! \tau_2^{(\varrho)}! \dots \tau_n^{(\varrho)}!} \\ &= \sum \prod_{i=1}^n \frac{a_i(r)!}{\tau_i^{(1)}! \tau_i^{(2)}! \dots \tau_i^{(\varrho)}!}. \end{aligned} \quad (8b)$$

Dabei sind die Nebenbedingungen der Summe in (8a) dieselben wie für die Summe (8b). Wir können daher setzen $\tau_i^{(i)} = \nu_i^{(i)}(r)$, die Ausdrücke (8a) und (8b) sind identisch, und die Behauptung (8) ist bewiesen.

Literatur

1. Curtis, Ch. W., Reiner, I.: Representation theory of finite groups and associative algebras, S. 234. New York: Interscience Publishers 1962.
2. Lomont, J. S.: Applications of finite groups, S. 225. New York: Academic Press 1959.
3. Mackey, G. W.: Am. J. Math. **73**, 576 (1951).
4. Pólya, G.: Acta Math. **68**, 145 (1937).
5. Ruch, E., Ugi, I.: Theoret. chim. Acta (Berl.) **4**, 287 (1966).
6. — — Topics in stereochemistry, Bd. 4 (Herausgeber: E. L. Eliel u. N. L. Allinger). New York: Interscience Publishers (im Druck).
7. — Schönhofer, A.: Theoret. chim. Acta (Berl.) **10**, 91 (1968).
8. — — Theoret. chim. Acta (Berl.) (im Druck).
9. — — Theoret. chim. Acta (Berl.) **3**, 291 (1965).

Professor Dr. E. Ruch
Institut für Quantenchemie
Freie Universität Berlin
D-1000 Berlin 45, Holbeinstraße 48