176. Molekel-Eigenfunktionen bestimmter Symmetrie: Linearkombinationen von P-Funktionen. Teil II: Molekel-Eigenfunktionen der Symmetrie C_{3v} und D_3

von E. Heilbronner und Hs. H. Günthard.

(11. VI. 54.)

Im Teil I der vorliegenden Arbeit[1]) haben wir gezeigt, wie jene Matrix **M** abgeleitet werden kann, welche entsprechend der Formel (I, 26)[2])

$$\widetilde{\{\varphi\}} = \widetilde{\{p\}}\,\mathbf{M} \tag{I, 26}$$

aus dem Zeilenvektor $\widetilde{\{p\}}$ aller P–AO's einer Molekel gegebener Punktsymmetrie den Zeilenvektor $\widetilde{\{\varphi\}}$ der richtigen Linearkombinationen liefert. Dabei konnte die Matrix **M** durch die Relation (I, 25) definiert werden[3]):

$$\mathbf{M} = (\mathbf{N} \times \mathbf{T}) \Big(\sum_{ij} l_i\, t_j\, \mathbf{U}^{(i,j)}\Big)\ ^{4}). \tag{I, 25}$$

Im vorliegenden Teil II soll am Beispiel der wichtigen Gruppe $\mathfrak{D}_3$ gezeigt werden, wie die Matrix **M** mittels (I, 25) explicite berechnet werden kann.

Molekel-Eigenfunktionen der Symmetrie C_{3v} und D_3[5]).

Der abstrakten Diedergruppe $\mathfrak{D}_3$ ($g = 6$) sind die beiden Symmetriegruppen C_{3v} und D_3 holoedrisch isomorph. Den Elementen E, A, A^2, C, AC und A^2C der abstrakten Gruppe entsprechen in C_{3v} die Elemente E, C_3 (z), C_3^{-1} (z), σ_v (1), σ_v (3) und σ_v (2), sowie in der Gruppe D_3 die Elemente E, C_3 (z), C_3^{-1} (z), C_2 (1), C_2 (3) und C_2 (2). Die Gruppe $\mathfrak{D}_3$ besitzt drei irreduzible Darstellungen: zwei vom Grad 1, nämlich $\Gamma^{(1)} = A_1$ und $\Gamma^{(2)} = A_2$, sowie eine vom Grad 2, $\Gamma^{(3)} = E$. Die reguläre Darstellung $\Gamma^{(\text{reg.})}$, definiert durch

$$G_{k,\,op}\{E\ A\ A^2\ C\ AC\ A^2C\} = \{E\ A\ A^2\ C\ AC\ A^2C\}\ \Gamma^{(\text{reg})}(G_k) \tag{1}$$

(vgl. (I, 8)), wird durch die unitäre Matrix **N** in ihre irreduziblen Bestandteile zerlegt:

$$\mathbf{N}^{\dagger}\,\Gamma^{(\text{reg.})}\,\mathbf{N} = A_1 \dotplus A_2 \dotplus 2\,E\,. \tag{2}$$

---

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

[2]) Jene Formel des Teils I, welche die Laufzahl (r) aufweist, soll hier jeweils durch das Symbol (I, r) gekennzeichnet werden.

[3]) Zur Definition der Grössen in Formel (I, 25) siehe Teil I, sowie: *Hs. H. Günthard, E. Heilbronner & B. Messikommer*, Helv. **35**, 2149 (1952).

[4]) Um Missverständnisse zu vermeiden sei explicite darauf hingewiesen, dass unter (**N** × **T**) der Formel (I, 25) das entsprechend der Bedingung α, β des Teils I umgeordnete, direkte Produkt aus **N** und **T** zu verstehen ist.

[5]) Betreffend die Definitionen der Symbole sei auf den Teil I verwiesen.

Diese Matrix **N** lautet explicite wie folgt, wobei hier an die durch (I, 27) definierte Bedeutung der Klammersymbole (k) erinnert werden soll.

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

$$\mathbf{N} = \left\{ \begin{array}{cccccc} 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} & 0 & 0 & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} & (2)/\sqrt{3} & 0 & 0 & (1)/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} & (1)/\sqrt{3} & 0 & 0 & (2)/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{6} & 0 & 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & 0 \\ 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{6} & 0 & (1)/\sqrt{3} & (2)/\sqrt{3} & 0 \\ 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{6} & 0 & (2)/\sqrt{3} & (1)/\sqrt{3} & 0 \end{array} \right\} \tag{3}$$

Der Parameter n der Klammersymbole (I, 27) in (3) nimmt dabei den für die gesamte vorliegende Abhandlung konstanten Wert 3 an.

Ersetzt man in der durch (3) definierten Matrix **N** jedes Element N_{ik} durch die Submatrix $N_{ik}\mathbf{E}$ ($[\mathbf{E}] = 3$)

$$N_{ik}\,\mathbf{E} = N_{ik}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{ik} & 0 & 0 \\ 0 & N_{ik} & 0 \\ 0 & 0 & N_{ik} \end{pmatrix}, \tag{4}$$

so erhalten wir eine neue Matrix $\mathbf{N} \times \mathbf{E}$ des Grades 18, welche die Darstellung Γ, die entsprechend (I, 14) durch folgende Relation definiert ist:

$$\mathrm{G}_{\mathrm{k,op}}\left\{p_{-1}^{(1)}\,p_{o}^{(1)}\,p_{+1}^{(1)}\,p_{-1}^{(2)}\,p_{o}^{(2)}\cdots p_{o}^{(6)}\,p_{+1}^{(6)}\right\} = \left\{p_{+1}^{(1)}\,p_{o}^{(1)}\,p_{-1}^{(1)}\,p_{+1}^{(2)}\,p_{o}^{(2)}\cdots p_{o}^{(6)}\,p_{+1}^{(6)}\right\}\boldsymbol{\Gamma}(\mathrm{G}_\mathrm{k}), \tag{5}$$

in eine direkte Summe von Matrizen $\boldsymbol{\Gamma}^{(i)}(\mathrm{G}_\mathrm{k}) \times \mathbf{D}(\mathrm{G}_\mathrm{k})$ (siehe Formel (I, 19)) zerlegt.

Die sechs Matrizen $\mathbf{D}(\mathrm{G}_\mathrm{k})$ lauten für die mit $\mathfrak{D}_3$ holoedrisch isomorphen Gruppen C_{3v} und D_3:

$\mathfrak{D}_3$	E	A	A²	C	AC	A²C
C_{3v}	E $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$C_3(z)$ $\begin{pmatrix} (2) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (1) \end{pmatrix}$	$C_3^{-1}(z)$ $\begin{pmatrix} (1) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (2) \end{pmatrix}$	$\sigma_v(1)$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\sigma_v(3)$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & (2) \\ 0 & 1 & 0 \\ (1) & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\sigma_v(2)$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & (1) \\ 0 & 1 & 0 \\ (2) & 0 & 0 \end{pmatrix}$
D_3	E $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$C_3(z)$ $\begin{pmatrix} (2) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (1) \end{pmatrix}$	$C_3^{-1}(z)$ $\begin{pmatrix} (1) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (2) \end{pmatrix}$	$C_2(1)$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$C_2(3)$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & (2) \\ 0 & -1 & 0 \\ (1) & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$C_2(2)$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & (1) \\ 0 & -1 & 0 \\ (2) & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Aus den Charakteren der Matrizen $\mathbf{D}(\mathrm{G}_\mathrm{k})$ lässt sich sofort ablesen, dass diese die folgenden irreduziblen Bestandteile enthalten:

Symmetriegruppe C_{3v}: $D = A_1 \dotplus E$ [1]);
Symmetriegruppe D_3: $D = A_2 \dotplus E$.

---

[1]) Eine Zusammenstellung der in den direkten Produkten irreduzibler Darstellungen enthaltenen irreduziblen Bestandteile findet man bei *G. Herzberg*, Infrared and Ramen Spectra of Polyatomic Molecules, New York, 1945.

Die Matrix $\mathbf{T}$[1]), welche entsprechend der Formel (I, 20) die Matrizen $\mathbf{D}\,(G_k)$ in die irreduziblen Bestandteile zerlegt, ist zusammen mit der Formel für den speziellen Fall der Symmetriegruppe C_{3v} unter (6) angegeben.

$$\mathbf{T}^{\dagger}\,\mathbf{D}\,(G_k)\,\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1(G_k) & 0 \\ 0 & \mathbf{E}\,(G_k) \end{pmatrix}; \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{6}$$

In (7) sei die Formel (6) zur Illustration speziell für das Element $C_2\,(3)$ dieser Symmetriegruppe angegeben:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & (2) \\ 0 & -1 & 0 \\ (1) & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & & \\ & 0 & (1) \\ & (2) & 0 \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Damit ergibt sich für die Konstanten t_i der folgende Satz von Werten:

Symmetriegruppe C_{3v}: $t_1 = 1,\quad t_2 = 0,\quad t_3 = 1;$
Symmetriegruppe D_3: $t_1 = 0,\quad t_2 = 1,\quad t_3 = 1.$

Das Problem hat sich nun darauf reduziert, diejenigen Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$ zu bestimmen, welche die direkten Produkte $\Gamma^{(i)} \times \Gamma^{(j)}$ in irreduzible Bestandteile zerlegen (siehe Formel (I, 23)). Bei den direkten Produkten handelt es sich in unserem Fall um:

1) $A_1 \times A_1$
2) $A_2 \times A_1$
3) $E \times A_1$
4) $A_2 \times A_2$
5) $E \times A_2$
6) $E \times E$

Die ersten fünf direkten Produkte und die dazugehörigen $\mathbf{U}^{(i,j)}$ sind offensichtlich Trivialfälle, da ja A_1 und A_2 vom Grad 1 sind, wodurch die Matrizen $\mathbf{U}^{(i,j)}$ entweder zur Zahl 1 oder zur Einheitsmatrix vom Grad 2 entarten.

Hingegen gibt das direkte Produkt (6) Matrizen vom Grad 4, die, wie in üblicher Weise aus den Charakterentabellen abgelesen werden kann, in folgende irreduzible Bestandteile zerfallen:

$$E \times E = A_1 \dotplus A_2 \dotplus E. \tag{8}$$

Die Matrix $\mathbf{U}^{(3,3)}$, welche die Ähnlichkeitstransformation

$$\mathbf{U}^{(3,3)\dagger}\,(E \times E)\,\mathbf{U}^{(3,3)} = A_1 \dotplus A_2 \dotplus E \tag{9}$$

bewerkstelligt, kann den Tabellen des in Vorbereitung befindlichen Teils III dieser Arbeit entnommen werden. Sie lautet für den vorliegenden Fall:

$$\mathbf{U}^{(3,3)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{10}$$

Die Berechnung der Matrix $\mathbf{M}$ erfolgt nun so, dass man die durch die Formel (I, 25) vorgeschriebenen Operationen ausführt.

---

[1]) Eine Tab. der Matrizen T findet sich in dem in Vorbereitung befindlichen Teil III dieser Arbeit.

Dazu ist es von Vorteil, bei der Berechnung des Ausdruckes

$$\sum_{i,j} l_i t_j U^{(i,j)} \tag{11}$$

so vorzugehen, dass man in einer Zeile alle möglichen Produkte zweier irreduzibler Darstellungen, charakterisiert durch das Index-Paar (i, j), in alphabetischer Reihenfolge aufschreibt und darunter die zugeordneten Grössen $l_i t_j$ sowie den Grad der Matrizen $U^{(i,j)}$. Die Summe der Produkte aus l_i, t_j und $[U^{(i,j)}]$ (d. h. der Zeilenzahl von $U^{(i,j)}$) dient dann zur Kontrolle, da immer gelten muss:

$$\sum_{i,j} l_i t_j [U^{(i,j)}] = 3g.$$

In unserem Beispiel sieht diese Tabelle wie folgt aus:

Symmetriegruppe C_{3v}.

Index-Paar:	(1,1)	(1,2)	(1,3)	(2,1)	(2,2)	(2,3)	(3,1)	(3,2)	(3,3)
α) $l_i t_j$:	1	0	1	1	0	1	2	0	2
β) $[U^{(i,j)}]$:	1	1	2	1	1	2	2	2	4
Produkt aus α) und β):	1	0	2	1	0	2	4	0	8
Zugehörigkeit:	A_1	A_2	E	A_2	A_1	E	E	E	$A_1 \dot{+} A_2 \dot{+} E$

Für die Symmetriegruppe D_3 ergibt sich eine ähnliche Tabelle.

Aus der Reihenfolge der direkten Produkte innerhalb der vorhergehenden Tabelle lässt sich auch die Zugehörigkeit der Kolonnen der Matrix **M** zu den einzelnen irreduziblen Darstellungen ablesen, da die Zerlegung der direkten Produkte durch die Matrizen $U^{(i,j)}$ so erfolgt, dass auch innerhalb dieser Zerlegung die natürliche Reihenfolge der irreduziblen Darstellungen gewahrt bleibt.

In unserem Fall ergibt sich demzufolge die in der nächsten Tabelle angegebene Zugehörigkeit der 18 Kolonnen der Matrix **M** zu den einzelnen irreduziblen Darstellungen. Für die beiden Symmetriegruppen C_{3v} und D_3 ergeben sich kleine Unterschiede, da D im ersten Fall in $A_1 \dot{+} E$, im zweiten aber in $A_2 \dot{+} E$ zerlegt wird.

Kol. Nr.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Irreduzible Darstellung C_{3v}	A_1	E	E	A_2	E	E	E	E	E	E	A_1	A_2	E	E	A_1	A_2	E	E
D_3	A_2	E	E	A_1	E	E	E	E	E	E	A_1	A_2	E	E	A_1	A_2	E	E

Damit ist die gestellte Aufgabe gelöst und sämtliche Linearkombinationen der P-Funktionen für einen Satz äquivalenter Teilchen eines Systems der Symmetrie C_{3v} oder D_3 können entsprechend der Formel (I, 26) aus der Matrix **M** abgelesen werden.

Matrix (N×T)V.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$
2	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0
4	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	$(1)/\sqrt{3}$
5	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	0
7	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	$(2)/\sqrt{3}$
8	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	0
10	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	0
11	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0
13	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	0	$(2)/\sqrt{3}$	0	0
14	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	$(2)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	0	$(2)/\sqrt{3}$	0	0	0
16	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	0	$(1)/\sqrt{3}$	0	0
17	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	$(1)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	0	$(1)/\sqrt{3}$	0	0	0

Matrix M.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	$1/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0
2	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{6}$	$-1/\sqrt{6}$	0	0
4	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	$(2)/\sqrt{6}$	$(2)/\sqrt{6}$	0	0	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	0
5	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	$(1)/\sqrt{6}$	$-(1)/\sqrt{6}$	0	0
7	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	$(1)/\sqrt{6}$	$(1)/\sqrt{6}$	0	0	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	0
8	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	$(2)/\sqrt{6}$	$-(2)/\sqrt{6}$	0	0
10	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	0	$1/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{6}$	0	$1/\sqrt{3}$
11	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	$1/\sqrt{6}$	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0
13	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	0	$(2)/\sqrt{6}$	$(2)/\sqrt{6}$	0	$(2)/\sqrt{3}$
14	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	$(1)/\sqrt{3}$	$(2)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	$(1)/\sqrt{6}$	$-(1)/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0
16	0	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	0	$(1)/\sqrt{6}$	$(1)/\sqrt{6}$	0	$(1)/\sqrt{3}$
17	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	$(2)/\sqrt{3}$	$(1)/\sqrt{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-1/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	$(2)/\sqrt{6}$	$-(2)/\sqrt{6}$	0	0	0	0	0	0

Diese Matrix **M** haben wir, ebenso wie die beiden Matrizen

$$(\mathbf{N} \times \mathbf{T})\,\mathbf{V}^{1)} \quad \text{und} \quad \sum_{i,j} l_i\, t_j\, \mathbf{U}^{(i,j)},$$

aus denen sie durch Multiplikation hervorgeht (siehe Formel (I, 25)), explicite angegeben.

Matrix $\sum_{i,j} l_i\, t_j\, \mathbf{U}^{(i,j)}$.

$$
\begin{array}{c}
\\ 1\\2\\3\\4\\5\\6\\7\\8\\9\\10\\11\\12\\13\\14\\15\\16\\17\\18
\end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{cccccccccccccccccc}
1&2&3&4&5&6&7&8&9&10&11&12&13&14&15&16&17&18
\end{array}\\
\left[\begin{array}{cccccccccccccccccc}
1&&&&&&&&&&&&&&&&&\\
&1&0&&&&&&&&&&&&&&&\\
&0&1&&&&&&&&&&&&&&&\\
&&&1&&&&&&&&&&&&&&\\
&&&&1&0&&&&&&&&&&&&\\
&&&&0&1&&&&&&&&&&&&\\
&&&&&&1&0&&&&&&&&&&\\
&&&&&&0&1&&&&&&&&&&\\
&&&&&&&&1&0&&&&&&&&\\
&&&&&&&&0&1&&&&&&&&\\
&&&&&&&&&&0&0&0&1&&&&\\
&&&&&&&&&&1/\sqrt{2}&1/\sqrt{2}&0&0&&&&\\
&&&&&&&&&&1/\sqrt{2}&-1/\sqrt{2}&0&0&&&&\\
&&&&&&&&&&0&0&1&0&&&&\\
&&&&&&&&&&&&&&0&0&0&1\\
&&&&&&&&&&&&&&1/\sqrt{2}&1/\sqrt{2}&0&0\\
&&&&&&&&&&&&&&1/\sqrt{2}&-1/\sqrt{2}&0&0\\
&&&&&&&&&&&&&&0&0&1&0
\end{array}\right]
\end{array}
$$

Der eine von uns (*E. H.*) dankt der *Rockefeller Foundation* in New York für die Unterstützung der vorliegenden Arbeit.

Zusammenfassung

Am Beispiel der wichtigen Symmetriegruppen C_{3v} und D_3 wird gezeigt, wie sich mittels der im Teil I abgeleiteten Formel (I, 25) jene Matrix **M** berechnen lässt, welche über die Formel (I, 26) die richtigen Linearkombinationen von P–AO's, die zu einer solchen Symmetriegruppe gehören, liefert. Die Matrix und die richtigen Linearkombinationen werden angegeben.

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

[1]) Die Matrix **V** bewirkt einzig jene triviale Vertauschung der Kolonnen von ($\mathbf{N} \times \mathbf{T}$), welche der im Paragraph d, β) des Teils I (Seite 1043) ausgesprochenen Forderung entspricht, dass sich die direkten Produkte der Formel (I, 22) in alphabetischer Reihenfolge präsentieren sollen. Vgl. Fussnote 4, Seite 1534.