Über einen Satz aus der Theorie der Kristallklassen.

Über einen Satz aus der Theorie der Kristallklassen

Von F. BÄBLER, Zürich

Die vorliegende Note enthält einen elementaren Beweis des folgenden Satzes: *Existiert eine beliebige reelle Matrix* T, *welche zwei orthogonale Matrizen* A *und* B *ineinander transformiert, so gibt es auch eine reelle orthogonale Matrix* S, *die dasselbe tut.* S *hängt nur von* T *ab.*

Der Satz spielt eine wesentliche Rolle bei der Einteilung der Kristallklassen. Eine jede solche Klasse kann nämlich durch eine Anzahl (n) orthogonaler Matrizen dargestellt werden. Sei $A_1, A_2, \ldots, A_n$ eine solche Klasse, $B_1, B_2, \ldots, B_n$ eine zweite ($A_\nu A'_\nu = B_\nu B'_\nu = E$, $\nu = 1, 2, \ldots, n$). Ferner existiere eine reelle Matrix T, so daß $T^{-1} A_\nu T = B_\nu$ für alle ν gilt. Dann heißen die beiden Klassen äquivalent. Der obige Satz führt jetzt unmittelbar zum folgenden Theorem:

Sind zwei Kristallklassen reell äquivalent, so sind sie auch reell-orthogonal äquivalent. Mit andern Worten: *Aus* T *reell und* $T^{-1} A_\nu T = B_\nu$ *folgt die Existenz von* S *reell, mit* $SS' = E$ *und* $S' A_\nu S = B_\nu$ *für alle* ν.

Zum Beweis dieses Theorems benutzt man meistens ein bekanntes, von Frobenius stammendes Verfahren. Das folgende besteht in einer Vereinfachung dieses Verfahrens, indem von den dort verwendeten Mitteln nur der elementare Matrizenkalkül benutzt wird.

Der Kern des Beweises besteht im Nachweis der Tatsache, daß alle A_ν mit $TT' = P$ und mit einer Wurzel Q der Matrizengleichung $Q^2 = P$ vertauschbar sind. Die transformierende orthogonale Matrix ist dann $S = Q^{-1} T$.

Sei $A = (a_{ik})$ eine n-reihige quadratische Matrix, A' wie üblich ihr Spiegelbild an der Hauptdiagonale und $AA' = E$; B ebenfalls quadratisch mit gleicher Zeilenzahl und $BB' = E$; $T = (t_{ik})$ reell und quadratisch, so daß gilt $T^{-1} AT = B$. Daraus folgt

$$T^{-1} ATT'A'T^{-1'} = BB' = E \ .$$

Durch Multiplikation mit T von links, T' und A von rechts, in dieser Reihenfolge, gewinnt man daraus die Gleichung

$$ATT' = TT'A \qquad \text{oder} \qquad AP = PA \; . \tag{I}$$

Die Matrix $TT' = P$ ist aber Matrix einer definit positiven quadratischen Form. In der Doppelsumme:

$$\sum_1^n {}^{\mu} \left[\sum_1^n {}^{\nu}\, t_{\nu\mu}\, x_\nu \right]^2 = \sum_1^n {}^{\mu} \sum_{i,k=1}^n t_{i\mu}\, t_{\kappa\mu}\, x_i\, x_\kappa$$

ist nämlich der Faktor von $x_i x_\kappa = \sum_1^n {}^{\mu}\, t_{i\mu}\, t_{\kappa\mu}$ für jedes Wertepaar i, κ. Das ist gerade das Element $p_{i\kappa}$ in der Matrix $TT' = P \doteq (p_{i\kappa})$. Nun sei O die reelle orthogonale Matrix, welche P auf Diagonalform transformiert

$$O'PO = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix} .$$

Wegen der Definitheit gilt $\lambda_i > 0$ für alle i. Der Transformation mit O werden auch T, A, B unterworfen. Sei

$$O'TO = \overline{T}\,; \qquad O'AO = \overline{A} = (\overline{a}_{i\kappa})\,; \qquad O'BO = \overline{B} \; .$$

Es ist $\overline{A}\,\overline{A}' = O'AOO'A'O = O'AA'O = E$, desgl. $\overline{B}\,\overline{B}' = E$, ferner

$$\overline{T}^{-1}\overline{A}\,\overline{T} = O'T^{-1}OO'AOO'TO = O'T^{-1}ATO = O'\,BO = \overline{B} \; .$$

Aus $\overline{T}^{-1}\overline{A}\,\overline{T}\,\overline{T}'\overline{A}'\overline{T}^{-1\prime} = \overline{B}\,\overline{B}' = E$ folgt wie oben für TT'

$$\overline{A}\,\overline{T}\,\overline{T}' = \overline{T}\,\overline{T}'\overline{A} \; . \tag{I$'$}$$

Setzt man noch $\overline{T}\,\overline{T}' = O'PO = \overline{P}$, so kann man statt 1$'$ schreiben

$$\overline{A}\,\overline{P} = \overline{P}\,\overline{A} \; . \tag{I$''$}$$

Die Diagonalmatrix $\overline{Q}$ mit den Elementen $\sqrt{\lambda_i}$ genügt der Gleichung

$$\overline{Q}^2 = \overline{P} \; .$$

$\overline{Q}^{-1}$ ist die Diagonalmatrix mit den Elementen $\frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}$. Es gilt

$$\overline{A}\,\overline{Q} = \overline{Q}\,\overline{A} \quad \text{und} \quad \overline{A}\,\overline{O}^{-1} = \overline{Q}^{-1}\overline{A} \; . \tag{*}$$

Aus $\overline{P}\,\overline{A} = \overline{A}\,\overline{P}$ folgt nämlich $\lambda_i \overline{a}_{i\kappa} = \lambda_\kappa \overline{a}_{i\kappa}$. Gilt $\lambda_i = \lambda_\kappa$, so ist $\overline{a}_{i\kappa}$ nur den Einschränkungen unterworfen, welche aus der Orthogonalität folgen. $\lambda_i \neq \lambda_\kappa$ zieht $\overline{a}_{i\kappa} = 0$ nach sich. Daraus folgt unmittelbar die Behauptung, da ja mit $\lambda_i = \lambda_\kappa$ bzw. $\lambda_i \neq \lambda_\kappa$ auch $\sqrt{\lambda_i} = \sqrt{\lambda_\kappa}$ bzw. $\sqrt{\lambda_i} \neq \sqrt{\lambda_\kappa}$ gilt.

Nun bilde man $Q = O\overline{Q}O'$, also $Q^{-1} = O\overline{Q}^{-1}O'$ und $S = Q^{-1}T$, also $S' = T' \cdot Q^{-1}$. S ist reell.

Dann gilt

$$\begin{aligned} SS' = Q^{-1}TT'Q^{-1} &= O\overline{Q}^{-1}O'O\overline{T}O'O\overline{T}'O'O\overline{Q}^{-1}O' = \\ &= O\overline{Q}^{-1}\,\overline{T}\,\overline{T}'\,\overline{Q}^{-1}O' = O\,\overline{Q}^{-1}\,\overline{Q}^2\,\overline{Q}^{-1}O' = E \; . \end{aligned}$$

S ist orthogonal. Transformiert man A mit S, so erhält man

$$\begin{aligned} S^{-1}AS = T^{-1}QAQ^{-1}T &= O\overline{T}^{-1}O'O\overline{Q}O'O\overline{A}O'O\overline{Q}^{-1}O'O\overline{T}O' = \\ &= O\overline{T}^{-1}\,\overline{Q}\,\overline{A}\,\overline{Q}^{-1}\overline{T}O' = O\,\overline{T}^{-1}\,\overline{A}\,\overline{T}\,O' \;\text{(wegen (*))} \\ &= O\overline{B}O' = B \; , \end{aligned}$$

was zu beweisen war.

(Eingegangen den 18. November 1946.)