Def: Es sei $G = \{Q, R \ldots\}$ eine Gruppe und $D = \{\Gamma\}$ eine Menge von quadratischen, nichtsingulären $(n \times n)$ Matrizen. Falls es eine Abbildung gibt

$$G \ni R \rightarrow \Gamma(R) \in D$$

mit der Eigenschaft $\Gamma(Q \cdot R) = \Gamma(Q) \cdot \Gamma(R)$, so heißt D (zusammen mit der Abbildung) eine Darstellung der Gruppe G; n heißt deren Dimension. D ist selbst eine Gruppe.

Reduzible und irreduzible DS

Eine Darstellung (DS) $\Gamma(R)$ von G heißt reduzibel, wenn es eine Ähnlichkeitstransformation **S** gibt, so daß für alle R die Matrizen $\tilde{\Gamma}(R) = S^{-1}\,\Gamma(R)\,S$ in die gleiche Blockstruktur zerfallen, d.h.

$$\tilde{\Gamma}(R) = \begin{pmatrix} \boxed{\Gamma_1(R)} & O & O & \\ O & \boxed{\Gamma_2(R)} & O & \\ O & O & \boxed{\Gamma_3(R)} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} = \Gamma_1(R) \oplus \Gamma_2(R) \oplus \Gamma_3(R) \oplus \ldots$$

"direkte Summe"

Andernfalls heißt $\Gamma(R)$ irreduzibel.
Die Blöcke $\Gamma_1(R)$, $\Gamma_2(R)$ bilden wiederum DS der Gruppe. Γ und $\tilde{\Gamma}$ heißen äquivalent.

Orthogonalitätstheorem (ohne Beweis)

Es sei h die Ordnung der Gruppe, l_i die Dimension der i-ten irred. DS $D^{(i)}$, R ein Element der Gruppe, $\Gamma^{(i)}(R)$ eine Darstellungsmatrix $\in D^{(i)}$ und $\Gamma^{(i)}_{nm}(R)$ das (n,m) Matrixelement von $\Gamma^{(i)}(R)$.
Für zwei nichtäquivalente, irreduzible, unitäre Darstellungen $D^{(i)}$ und $D^{(j)}$ gilt

$$\boxed{\sum_R \Gamma^{(i)}_{nm}(R)\,\Gamma^{(j)}_{n'm'}(R)^* = \frac{h}{l_i}\,\delta_{ij}\,\delta_{nn'}\,\delta_{mm'}}$$

Dabei können die Dimensionen von $D^{(i)}$ und $D^{(j)}$ verschieden sein.

Folgerung: $\underline{\underline{\sum_i l_i^2 = h}}$ über alle nicht-äquiv. irred. DS

Beweis für : $\sum l_i^2 \leq h$

Für festes n,m ist $\left\{ \Gamma^{(i)}_{nm}(R_1), \ldots \Gamma^{(i)}_{nm}(R_h) \right\}$ ein h-dimensionaler Vektor. Jede Irrep. liefert nach Orthogonalitätstheorem l_i^2 orthogonale Vektoren, deren Maximum (dim = h) ist h *(q.e.d)*.

Die Mulliken-Notation für die irreduziblen DS

1.) Alle eindim. Irreps. werden bezeichnet
mit A oder B,
zweidim. Irreps mit E,
dreidim. Irreps mit T (auch F; nur bei ≥ 2 höherzähligen Achsen)
vierdim. Irreps mit G (nur Ikosaedergruppen)
fünfdim. Irreps mit H (nur Ikosaedergruppen)

2.) Eindim. Irreps A sind symmetrisch unter C_n
" – B sind antisymm. – " –

3.) Indices 1 oder 2 kennzeichnen, ob Irrep. symmetrisch oder antisymm. bezüglich einer C_2-Achse ⊥ zur Hauptdrehachse ist. Fehlt eine solche C_2-Achse, bezieht sich der Index auf σ_v (vertikale Spiegelebene).

4.) Strich oder Doppelstrich kennzeichnen DS, die symmetrisch bzw. antisymm. sind bez. σ_h (Spiegelebene ⊥ Hauptdrehachse).

5.) In Gruppen mit Inversionszentrum (i) steht Index g(u) für gerade (ungerade) bezüglich Inversion.