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 <u>nichtäquivalente</u>, irreduzible, <u>unitäre</u> Darstellungen $D^{(i)}$ und $D^{(j)}$ gilt

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

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

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

Beweis für : $\sum l_i^2 \quad \leq \quad h$

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.