Gruppentheorie und Symmetrie in der Chemie

Martin Schütz
Institut für theoretische Chemie, Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 55, D-70569 Stuttgart

Stuttgart, 30. April 2002

Matrixdarstellung von Gruppen

- Gegeben sei eine Gruppe $\mathscr{G} = \{E, A, B, \ldots\}$ und ein n-dimensionaler Darstellungsraum $\mathscr{L}$.

- Jedes Element $G \in \mathscr{G}$ sei ein linearer Operator, der $\mathscr{L}$ auf sich selbst abbildet (z.B. Symmetrieoperatoren, Permutationsoperatoren).

$\Rightarrow$ Jedem Element G entspricht in $\mathscr{L}$ eine *Matrixdarstellung* $\mathbf{D}(G)$ (eine $n \times n$ Matrix).

$\Rightarrow$ Die Gruppe dieser Matrixdarstellungen $\mathscr{G}' = \{\mathbf{D}(E), \mathbf{D}(A), \mathbf{D}(B), \ldots\}$ hat dieselbe Gruppenstruktur wie $\mathscr{G}$ (gleiche Multiplikationstabelle).

- Man sagt: "$\mathscr{G}$ und $\mathscr{G}'$ sind *homomorph*".

Beispiel: Matrixdarstellung von $\mathscr{S}_3$

- Die sechs Permutationen dreier Objekte werden als *Zeilenvektor* geschrieben:

$$(XYZ\ ZXY\ YZX\ XZY\ ZYX\ YXZ)$$

- Innerhalb dieses 6-dimansionalen Darstellungsraums kann die Wirkung der Permutationsoperatoren $G \in \mathscr{S}_3$ auf diesen Zeilenvektor folgendermassen geschrieben werden:

$$\begin{aligned} & G(XYZ\ ZXY\ YZX\ XZY\ ZYX\ YXZ) \\ & \quad = \quad (XYZ\ ZXY\ YZX\ XZY\ ZYX\ YXZ)\mathbf{D}(G), \end{aligned}$$

wobei $\mathbf{D}(G)$ eine 6×6 matrix ist.

Beispiel: Matrixdarstellung von $\mathscr{S}_3$

- Für $A = (312)$ ergibt sich

$$
\begin{aligned}
& A(XYZ\ ZXY\ YZX\ XZY\ ZYX\ YXZ) \\
& \quad = \quad (ZXY\ YZX\ XYZ\ YXZ\ XZY\ ZYX) \\
& \quad = \quad (XYZ\ ZXY\ YZX\ XZY\ ZYX\ YXZ)\mathbf{D}(A), \ \ \mathrm{mit}
\end{aligned}
$$

$$
\mathbf{D}(A) = \begin{pmatrix}
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0
\end{pmatrix}
$$

Beispiel: Matrixdarstellung von $\mathscr{S}_3$

$$\mathbf{D}(E) = \begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{D}(A) = \begin{pmatrix} 0&0&1&0&0&0\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 0&0&0&1&0&0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{D}(B) = \begin{pmatrix} 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&1&0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{D}(C) = \begin{pmatrix} 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{D}(D) = \begin{pmatrix} 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&1&0&0&0\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{D}(F) = \begin{pmatrix} 0&0&0&0&0&1\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&1&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0\\ 1&0&0&0&0&0 \end{pmatrix}$$

- Es gilt für $G, H, F \in \mathscr{S}_3$, und $\mathbf{D}(G), \mathbf{D}(H), \mathbf{D}(F) \in \mathscr{S}_3{}'$:

$$GH = F \Rightarrow \mathbf{D}(G)\mathbf{D}(H) = \mathbf{D}(F),$$

z.B.: $\mathbf{D}(D)\mathbf{D}(F) = \mathbf{D}(A)$ (Matrixmultiplikation)

Multiplikation von Operatoren und Matrizen

- Die Operatoren G, H wirken nur auf den Vektor $(XYZ\ ZXY\ldots)$, nicht aber auf die Matrixdarstellungen. Deshalb gilt für $F = GH$:

$$\begin{aligned} GH(XYZ\ ZXY\ldots) &= [G(XYZ\ ZXY\ldots)]\mathbf{D}(H) \\ &= (XYZ\ ZXY\ldots)\mathbf{D}(G)\mathbf{D}(H) \\ &= (XYZ\ ZXY\ldots)\mathbf{D}(F), \end{aligned}$$

- …und nicht

$$\begin{aligned} GH(XYZ\ ZXY\ldots) &= G[(XYZ\ ZXY\ldots)\mathbf{D}(H)] \\ &= (XYZ\ ZXY\ldots)\mathbf{D}(H)\mathbf{D}(G) \\ &\neq (XYZ\ ZXY\ldots)\mathbf{D}(F). \end{aligned}$$

Beispiel: Matrixdarstellung von $\mathscr{D}_3$ im 3-D Raum

- Wahl der Basis $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ mit $\mathbf{e}_z \equiv C_3$ und $\mathbf{e}_x \equiv C_2$

$$\mathbf{D}(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{D}(C_3) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{D}(C_3^2) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{D}(C_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{D}(C_2') = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{D}(C_2'') = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- z.B.: $C_2'C_2'' = \mathbf{D}(C_2')\mathbf{D}(C_2'') = \mathbf{D}(C_3)$ aus Matrixmultiplikation, in Übereinstimmung mit Multiplikationstabelle von $\mathscr{D}_3$ (C_2'' vor C_2').
- Die Matrixdarstellungen aller Gruppenelemente $\mathbf{D}(\mathscr{D}_3)$ geblockt, $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y)$ und $\mathbf{e}_z$ transformieren getrennt.
  $\Rightarrow$ Der Raum $\mathscr{L}$ kann als *direkte Summe* zweier Unterräume geschrieben werden, $\mathscr{L} = \mathscr{L}_1 \oplus \mathscr{L}_2$.

Matrixdarstellung

- Ein Wechsel der Basis des Darstellungsraums $\mathscr{L}$ ersetzt die Matrixdarstellung $\mathbf{D}(\mathscr{G})$ der Gruppe $\mathscr{G}$ durch eine äquivalente Matrixdarstellung:

  Sei $\mathbf{D}(G)$ die Matrixdarstellung des Gruppenelements $G \in \mathscr{G}$, so wird durch Wechsel der Basis von $\mathscr{L}$ durch *Ähnlichkeitstransformation* eine äquivalente Matrixdarstellung

  $$\mathbf{D}'(G) = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(G)\mathbf{X}$$

  erzeugt, wobei die Matrix $\mathbf{X}$ die alte Basis auf die Neue transformiert.

- Matrixdarstellungen sind somit nicht eindeutig, sondern basisabhängig, deswegen *Homomorphismus* und nicht Isomorphismus für die Matrixdarstellung einer Gruppe.

- Für das Produkt zweier Matrixdarstellungen gilt:

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}'(G)\mathbf{D}'(H) &= \mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(G)\mathbf{X}\mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(H)\mathbf{X} = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(G)\mathbf{D}(H)\mathbf{X} = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(F)\mathbf{X} \\
&= \mathbf{D}'(F)
\end{aligned}$$

Neue, geblockte Matrixdarstellung für $\mathscr{S}_3$

- **Idee: Transformation der Basis**, um geblockte Matrixdarstellung der Permutationsoperatoren zu erreichen.

- Neuer Zeilenvektor $(\chi_1 \;\; \chi_2 \;\; \chi_3 \;\; \chi_4 \;\; \chi_5 \;\; \chi_6)$
  (Basis des 6-D Raums der Permutationen dreier Objekte), mit

$$\begin{aligned}
\chi_1 &= \tfrac{1}{\sqrt{6}}\{XYZ + ZXY + YZX + XZY + ZYX + YXZ\} \\
\chi_2 &= \tfrac{1}{\sqrt{6}}\{XYZ + ZXY + YZX - XZY - ZYX - YXZ\} \\
\chi_3 &= \tfrac{1}{\sqrt{12}}\{2XYZ - ZXY - YZX + 2XZY - ZYX - YXZ\} \\
\chi_4 &= \tfrac{1}{2}\{ZXY - YZX - ZYX + YXZ\} \\
\chi_5 &= \tfrac{1}{2}\{-ZXY + YZX - ZYX + YXZ\} \\
\chi_6 &= \tfrac{1}{\sqrt{12}}\{2XYZ - ZXY - YZX - 2XZY + ZYX + YXZ\}
\end{aligned}$$

- Für die zu den alten Matrixdarstellungen *äquivalenten* neuen Matrixdarstellungen gilt:

$$G(\chi_1 \;\; \chi_2 \;\; \chi_3 \;\; \chi_4 \;\; \chi_5 \;\; \chi_6) = (\chi_1 \;\; \chi_2 \;\; \chi_3 \;\; \chi_4 \;\; \chi_5 \;\; \chi_6)\mathbf{D}(G).$$

Neue, geblockte Matrixdarstellung für $\mathscr{S}_3$

D(E) =(123) $= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

D(A) =(312) $= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

D(B) =(231) $= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

D(C) =(132) $= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

D(D) =(321) $= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$

D(F) =(213) $= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$

Neue, geblockte Matrixdarstellung für $\mathscr{S}_3$

- Durch Adaptierung der Basis für $\mathscr{L}$ wurde eine Blockung der Matrixdarstellungen erreicht. Diese lassen sich jetzt durch 1×1 und 2×2 Matrizen darstellen:

$$
\begin{array}{llll}
G = \ldots & E & A & B \\
\mathbf{D}^1(G) = & 1 & 1 & 1 \\
\mathbf{D}^2(G) = & 1 & 1 & 1 \\
\mathbf{D}^3(G) = & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{llll}
G = \ldots & C & D & F \\
\mathbf{D}^1(G) = & 1 & 1 & 1 \\
\mathbf{D}^2(G) = & -1 & -1 & -1 \\
\mathbf{D}^3(G) = & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}
\end{array}
$$

- Der Darstellungsraum $\mathscr{L}$ ist die direkte Summe von zwei 1-D und zwei 2-D *irreduziblen Unterräumen*, $\mathscr{L} = \mathscr{L}_1 \oplus \mathscr{L}_2 \oplus \mathscr{L}_3 \oplus \mathscr{L}_4$

Irreduzible Darstellungen (Irreps) und Charakter

- Neue, geblockte Matrixdarstellungen können durch Wahl einer geeigneten Basis des Darstellungsraums $\mathscr{L}$ gewonnen werden, d.h. mittels einer Ähnlichkeitstransformation

$$\mathbf{D}'(G) = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(G)\mathbf{X}, \forall G \in \mathscr{G}.$$

- Falls keine weitere Vereinfachung durch Ähnlichkeitstransformation erreicht werden kann (maximale Blockung der Matrizen), bezeichnet man die so erhaltenen Gruppen von Untermatrizen $\mathbf{D}^{\alpha}(\mathscr{G})$ als *irreduzible Darstellungen (Irreps)* der Gruppe $\mathscr{G}$.
Wir haben somit drei verschiedene Irreps von $\mathscr{S}_3$ gefunden.

- Die *Spur* einer Matrix ist invariant bezüglich einer Ähnlichkeitstransformation: äquivalente Matrixdarstellungen haben dieselbe Spur.
Die Spur der Matrix $\mathbf{D}(G)$ wird *Charakter* von G in der Darstellung $\mathbf{D}(\mathscr{G})$ genannt:

$$\chi(G) = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{D}_{ii}(G)$$

Charakter von Darstellungen

- Charaktertafel für die oben gefundenen irreduziblen Matrixdarstellungen **D**$(\mathscr{S}_3)$:

$G =$	E	A	B	C	D	F	
$\chi^1(G)$	1	1	1	1	1	1	(1×)
$\chi^2(G)$	1	1	1	-1	-1	-1	(1×)
$\chi^3(G)$	2	-1	-1	0	0	0	(2×)
$\chi(G)$	6	0	0	0	0	0	

- Gruppenelemente derselben Klasse sind äquivalent, haben somit gleichen Charakter:

$G =$	E	$\{A, B\}$	$\{C, D, F\}$	
$\chi^1(G)$	1	1	1	(1×)
$\chi^2(G)$	1	1	-1	(1×)
$\chi^3(G)$	2	-1	0	(2×)
$\chi(G)$	6	0	0	

- Die Charaktere der reduziblen Darstellung entsprechen der Summe der Charaktere der daraus hervorgegangenen Irreps.

Einige Sätze der Darstellungstheorie endlicher Gruppen

(1) Die Anzahl verschiedener Irreps einer endlichen Gruppe $\mathscr{G}$ entspricht der Anzahl Klassen N_k in $\mathscr{G}$.

Beispiel $\mathscr{S}_3, \mathscr{D}_3$**:** beide haben 3 Klassen und 3 verschiedene Irreps.

(2) Die Dimensionen dieser Irreps $\mathbf{D}^1(\mathscr{G}), \mathbf{D}^2(\mathscr{G}), \ldots \mathbf{D}^{N_k}(\mathscr{G})$ seien $n_1, n_2, \ldots, n_{N_k}$. Dann gilt:

$$n_1^2 + n_2^2 + \ldots + n_{N_k}^2 = g$$

Beispiel $\mathscr{S}_3, \mathscr{D}_3$**:** $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1 + 1 + 4 = 6$

(3) Die Matrizen $\mathbf{D}^\alpha(G)$ sind *unitär*:

$$\mathbf{D}^\alpha(G) = \mathbf{D}^\alpha(G^{-1})^\dagger, \forall G \in \mathscr{G}$$

Beispiel $\mathscr{S}_3, \mathscr{D}_3$**:**

$$\mathbf{D}^3(A) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}^3(A^{-1}) = \mathbf{D}^3(B) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \mathbf{D}^3(A)^\dagger$$

Das grosse Orthogonalitätstheorem (GOT)

(4) Gegeben seien alle Irreps $\mathbf{D}^{\alpha}(\mathscr{G})$ der endlichen Gruppe $\mathscr{G}$ der Ordnung g. $\mathsf{D}^{\alpha}_{ij}(G)$ sei das Element ij der irreduziblen Matrixdarstellung $\mathbf{D}^{\alpha}(G), G \in \mathscr{G}$ der Dimension n_{α}. Dann gilt:

$$\sum_{G} \mathsf{D}^{\alpha}_{ij}(G)^{*}\mathsf{D}^{\beta}_{kl}(G) = \left(\frac{g}{n_{\alpha}}\right)\delta_{\alpha\beta}\delta_{ik}\delta_{jl}.$$

- **Beweis:** z.B. in Tinkham

Beispiel $\mathscr{S}_3, \mathscr{D}_3$:

$$\sum_{G} \mathsf{D}^{3}_{11}(G)^{*}\mathsf{D}^{3}_{11}(G) = 1\cdot 1+(-\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})+(-\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})+1\cdot 1+(-\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})+(-\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2}) = \tfrac{6}{2}$$

$$\sum_{G} \mathsf{D}^{3}_{12}(G)^{*}\mathsf{D}^{3}_{12}(G) = (-\tfrac{\sqrt{3}}{2})(-\tfrac{\sqrt{3}}{2}) + (\tfrac{\sqrt{3}}{2})(\tfrac{\sqrt{3}}{2}) + (-\tfrac{\sqrt{3}}{2})(-\tfrac{\sqrt{3}}{2}) + (\tfrac{\sqrt{3}}{2})(\tfrac{\sqrt{3}}{2}) = \tfrac{6}{2}$$

$$\sum_{G} \mathsf{D}^{3}_{12}(G)^{*}\mathsf{D}^{3}_{21}(G) = (-\tfrac{\sqrt{3}}{2})(\tfrac{\sqrt{3}}{2}) + (\tfrac{\sqrt{3}}{2})(-\tfrac{\sqrt{3}}{2}) + (-\tfrac{\sqrt{3}}{2})(-\tfrac{\sqrt{3}}{2}) + (\tfrac{\sqrt{3}}{2})(\tfrac{\sqrt{3}}{2}) = 0$$

Das grosse Orthogonalitätstheorem (GOT)

(5) Aus dem GOT folgt für Charaktere $\chi^\alpha(G)$

$$\sum_G \chi^\alpha(G)^* \chi^\beta(G) = g\delta_{\alpha\beta},$$

(6) . . . und für Klassen

$$\sum_k^{N_k} n_k \chi^\alpha(G_k)^* \chi^\beta(G_k) = g\delta_{\alpha\beta},$$

wobei für G_k aus jeder Klasse k mit n_k Elementen nur ein einziges Element ausgewählt wird, das die Klasse k repräsentiert.

Beispiel $\mathscr{S}_3, \mathscr{D}_3$**:**

$$\sum_{k=1}^{3} n_k \chi^3(G_k)^* \chi^3(G_k) = 1 \cdot 2 \cdot 2 + 2 \cdot (-1) \cdot (-1) = 6$$

$$\sum_{k=1}^{3} n_k \chi^2(G_k)^* \chi^3(G_k) = 1 \cdot 1 \cdot 2 + 2 \cdot 1 \cdot (-1) = 0$$

Zerlegung reduzibler Darstellungen in Irreps

(7) Eine reduzible Darstellung $\mathbf{D}(\mathscr{G})$ kann durch Ähnlichkeitstransformation auf die Form

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathscr{G}) &= \begin{pmatrix} \mathbf{D}^{\alpha}(\mathscr{G}) & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \ldots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{\beta}(\mathscr{G}) & \mathbf{0} & \ldots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix} \\ &= c_{\alpha}\mathbf{D}^{\alpha}(\mathscr{G}) \oplus c_{\beta}\mathbf{D}^{\beta}(\mathscr{G}) \oplus \cdots\end{aligned}$$

gebracht werden, wobei die Koeffizienten c_{α} angeben, wieviele Male die Irrep $\mathbf{D}^{\alpha}(\mathscr{G})$ in der reduziblen Darstellung $\mathbf{D}(\mathscr{G})$ auftritt.

- Für die Charaktere der reduziblen Darstellungen gilt: $\chi(G) = \sum_{\alpha} c_{\alpha}\chi^{\alpha}(G)$,

$$\text{und} \quad \sum_{k}^{N_k} n_k \chi^{\beta}(G_k)^* \chi(G_k) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \sum_{k}^{N_k} n_k \chi^{\beta}(G_k)^* \chi^{\alpha}(G_k) \stackrel{\text{GOT}}{=} g c_{\beta},$$

$$\text{also} \quad c_{\beta} = \frac{1}{g} \sum_{k}^{N_k} n_k \chi^{\beta}(G_k)^* \chi(G_k)$$

Zerlegung reduzibler Darstellungen in Irreps

- Wir haben $\chi(G) = \sum_\alpha c_\alpha \chi^\alpha(G)$ und $\chi(G)^* = \sum_\alpha c_\alpha \chi^\alpha(G)^*$, daraus

$$\sum_k^{N_k} n_k \chi(G_k)^* \chi(G_k) = \sum_\alpha \sum_\beta c_\alpha c_\beta \sum_k^{N_k} n_k \chi^\alpha(G_k)^* \chi^\beta(G_k) \stackrel{\mathrm{GOT}}{=} \sum_\alpha \sum_\beta c_\alpha c_\beta g \delta_{\alpha\beta}$$

$$\text{oder} \quad \sum_k^{N_k} n_k |\chi(G_k)|^2 = g \sum_\alpha c_\alpha^2.$$

- Ist die ursprüngliche Darstellung $\mathbf{D}(\mathscr{G})$ bereits irreduzibel, sind alle Koeffizienten c_α 0 ausser einem, der 1 ist. Es gilt dann:

$$\sum_k^{N_k} n_k |\chi(G_k)|^2 = g.$$

Beispiel $\mathscr{S}_3, \mathscr{D}_3$:

$$\mathbf{D}(\mathscr{S}_3) = \mathbf{D}^3(\mathscr{S}_3) :\Rightarrow \sum_k^{N_k} n_k |\chi(G_k)|^2 = 1 \cdot 2^2 + 2 \cdot (-1)^2 + 3 \cdot 0 = 6$$