4. Ομάδες Σημείου

Διδακτικοί στόχοι

Μετά την ολοκλήρωση της μελέτης του κεφαλαίου αυτού θα μπορείτε να ...

- ορίζετε την έννοια της ομάδας σημείου ενός μορίου
- διακρίνετε τις βασικές κατηγορίες ομάδων σημείου
- διακρίνετε τις βασικές ομάδες σημείου κάθε κατηγορίας
- βρίσκετε την ομάδα σημείου ενός μορίου

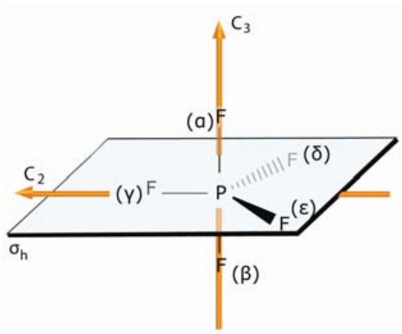
Προαπαιτούμενες γνώσεις

Ευχέρεια στον εντοπισμό των στοιχείων συμμετρίας περιστροφής, στροφοκατοπτρισμού, κατοπτρισμού και αναστροφής, στην εκτέλεση των αντίστοιχων διεργασιών και στην εύρεση των διεργασιών που προκύπτουν από τους συνδυασμούς και τις δυνάμεις των παραπάνω διεργασιών.

.

4.1 Εύρεση του Συνόλου των Διεργασιών Συμμετρίας ενός Μορίου

Όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο η περιγραφή της συμμετρίας ενός μορίου στα πλαίσια της μοριακής συμμετρίας συνίσταται στην εύρεση και καταγραφή του συνόλου των στοιχείων και διεργασιών συμμετρίας που απαντώνται στο μόριο. Το σύνολο αυτό πρέπει να είναι πλήρες, δηλαδή να περιέχει όλες τις απλές διεργασίες συμμετρίας καθώς και αυτές που προκύπτουν από τους συνδυασμούς τους ή τις δυνάμεις τους.



Σχήμα 4.1α. Στοιχεία συμμετρίας C_3, C_2 και σ_h στο μόριο PF_5

Η διαδικασία εύρεσης των στοιχείων και διεργασιών συμμετρίας συνίσταται κατ' αρχή στην κατανόηση της γεωμετρίας του μορίου και στον εντοπισμό ενός όσο το δυνατόν μεγαλύτερου αριθμού στοιχείων συμμετρίας. Στη συνέχεια με βάση τους συνδυασμούς και τις δυνάμεις των διεργασιών που έχουν εντοπισθεί προκύπτουν οι υπόλοιπες διεργασίες συμμετρίας και τα αντίστοιχα στοιχεία συμμετρίας. Στο *Σχήμα 4.1α* δίνονται τρία προφανή στοιχεία συμμετρίας του τριγωνικού διπυραμιδικού μορίου PF_5. Τα στοιχεία αυτά είναι ο άξονας C_3 που ταυτίζεται με την ομάδα F(α)-P-F(β), ο άξονας C_2 που ταυτίζεται με την ομάδα P-F(γ) και το επίπεδο σ_h που ταυτίζεται με το ισημερινό επίπεδο του μορίου, PF(γ)F(δ)F(ε). Οι αντίστοιχες διεργασίες είναι οι $\boldsymbol{C}_3$, $\boldsymbol{C}_2$ και $\boldsymbol{\sigma}_h$. Με βάση αυτές μόνο τις διεργασίες θα δούμε στη συνέχεια πως προκύπτει το πλήρες σύνολο των στοιχείων και διεργασιών συμμετρίας του μορίου.

Από τις δυνάμεις της διεργασίας $\boldsymbol{C}_3$ προκύπτουν οι νέες διεργασίες $\boldsymbol{C}_3^2$ και $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{C}_3^3$. Από το συνδυασμό $\boldsymbol{\sigma}_h\boldsymbol{C}_3$ προκύπτει η διεργασία $\boldsymbol{S}_3=\boldsymbol{\sigma}_h\boldsymbol{C}_3$ ενώ από τις δυνάμεις της διεργασίας $\boldsymbol{S}_3$ προκύπτει η νέα διεργασία $\boldsymbol{S}_3^5$. Έτσι προκύπτει ένα σύνολο διεργασιών συμμετρίας [$\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{C}_3$, $\boldsymbol{C}_3^2$, $\boldsymbol{C}_2$, $\boldsymbol{\sigma}_h$, $\boldsymbol{S}_3$, $\boldsymbol{S}_3^5$].

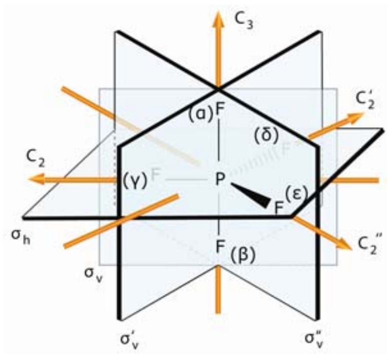
Οι υπόλοιπες διεργασίες συμμετρίας του μορίου, εάν υπάρχουν, μπορούν να προκύψουν από τους συνδυασμούς των παραπάνω διεργασιών. Παρατηρώντας τους παρακάτω συνδυασμούς των διεργασιών του παραπάνω συνόλου, προκύπτει ότι κάποιοι συνδυασμοί ισοδυναμούν με μια διεργασία που ανήκει στο σύνολο αυτό, ενώ για κάποιους άλλους, που επισημαίνονται με σκίαση, δεν υπάρχει ισοδύναμη διεργασία συμμετρίας που να ανήκει στο σύνολο.

$\boldsymbol{E}\boldsymbol{C}_3=\boldsymbol{C}_3$	$\boldsymbol{E}\boldsymbol{C}_3^2=\boldsymbol{C}_3^2$	$\boldsymbol{E}\boldsymbol{C}_2=\boldsymbol{C}_2$	$\boldsymbol{E}\boldsymbol{\sigma}_h=\boldsymbol{\sigma}_h$	$\boldsymbol{E}\boldsymbol{S}_3=\boldsymbol{S}_3$	$\boldsymbol{E}\boldsymbol{S}_3^5=\boldsymbol{S}_3^5$
$\boldsymbol{C}_3\boldsymbol{E}=\boldsymbol{C}_3$	$\boldsymbol{C}_3\boldsymbol{C}_3^2=\boldsymbol{E}$	$\boldsymbol{C}_3\boldsymbol{C}_2=\_$	$\boldsymbol{C}_3\boldsymbol{\sigma}_h=\boldsymbol{S}_3$	$\boldsymbol{C}_3\boldsymbol{S}_3=\boldsymbol{S}_3^5$	$\boldsymbol{C}_3\boldsymbol{S}_3^5=\boldsymbol{\sigma}_h$
$\boldsymbol{C}_3^2\boldsymbol{E}=\boldsymbol{C}_3^2$	$\boldsymbol{C}_3^2\boldsymbol{C}_3=\boldsymbol{E}$	$\boldsymbol{C}_3^2\boldsymbol{C}_2=\_$	$\boldsymbol{C}_3^2\boldsymbol{\sigma}_h=\boldsymbol{S}_3^5$	$\boldsymbol{C}_3^2\boldsymbol{S}_3=\boldsymbol{\sigma}_h$	$\boldsymbol{C}_3^2\boldsymbol{S}_3^5=\boldsymbol{S}_3$

$C_2E=C_2$	$C_2C_3=\_$	$C_2C_3^2=\_$	$C_2\sigma_h=\_$	$C_2S_3=\_$	$C_2S_3^5=\_$
$\sigma_hE=\sigma_h$	$\sigma_hC_3=S_3$	$\sigma_hC_3^2=S_3^5$	$\sigma_hC_2=\_$	$\sigma_hS_3=C_3$	$\sigma_hS_3^5=C_3^2$
$S_3E=S_3$	$S_3C_3=S_3^5$	$S_3C_3^2=\sigma_h$	$S_3C_2=\_$	$S_3\sigma_h=C_3$	$S_3S_3^5=E$
$S_3^5E=S_3^5$	$S_3^5C_3=\sigma_h$	$S_3^5C_3^2=S_3$	$S_3^5C_2=\_$	$S_3^5\sigma_h=C_3^2$	$S_3^5S_3=E$

Οι συνδυασμοί αυτοί ισοδυναμούν με τις νέες διεργασίας συμμετρίας C_2', C_2'', σ_v, σ_v', και σ_v'', που φαίνονται στο *Σχήμα 4.1β*, και για τους οποίους είναι εύκολο να διαπιστωθεί ότι:

$C_2C_3=C_2'$	$C_2C_3^2=C_2''$	$\sigma_hC_2=\sigma_v$	$C_2S_3=\sigma_v'$	$S_3C_2=\sigma_v''$
$C_3^2C_2=C_2'$	$C_3C_2=C_2''$	$C_2\sigma_h=\sigma_v$	$S_3^5C_2=\sigma_v'$	$C_2S_3^5=\sigma_v''$



Σχήμα 4.1β. Τα στοιχεία συμμετρίας του μορίου PF_5

Έτσι, στα παραπάνω στοιχεία συμμετρίας του μορίου προστίθενται οι δύο άξονες C_2' και C_2'' που συμπίπτουν με τους άξονες P-F(δ) και P-F(ε) αντιστοίχως και τα επίπεδα κατοπτρισμού σ_v, σ_v' και σ_v'' που περιέχουν τους άξονες C_2, C_2' και C_2'' και συμπίπτουν με τα επίπεδα PF(α)F(β)F(γ), PF(α)F(β)F(δ) και PF(α)F(β)F(ε) αντιστοίχως. Οι άξονες C_3 και S_3 αποτελούν την τομή των επιπέδων σ_v, σ_v' και σ_v'' και οι άξονες C_2, C_2' και C_2'' την τομή του επιπέδου σ_h με καθένα από τα επίπεδα σ_v, σ_v' και σ_v'' αντιστοίχως. Τελικά, το πλήρες σύνολο διεργασιών συμμετρίας του μορίου PF_5 διαμορφώνεται ως :

$$[E, C_3, C_3^2, C_2, C_2', C_2'', \sigma_h, S_3, S_3^5, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v'']$$

Από τη μελέτη των συνδυασμών των διεργασιών συμμετρίας προκύπτουν οι παρακάτω γενικοί κανόνες με βάση τους οποίους μετά τον εντοπισμό ορισμένων στοιχείων συμμετρίας μπορεί να προβλεφθεί η ύπαρξη νέων.

1. Ο συνδυασμός δύο διεργασιών περιστροφής ισοδυναμεί πάντα με διεργασία περιστροφής.
2. Ο συνδυασμός των διεργασιών κατοπτρισμού σε δύο επίπεδα σ και σ' που σχηματίζουν μεταξύ τους γωνία φ ισοδυναμεί με διεργασία περιστροφής κατά 2φ, C_n (όπου $n=2\pi/2\varphi$), περί άξονα που ταυτίζεται με την τομή των δύο επιπέδων. Αυτό σημαίνει ότι η ύπαρξη των επιπέδων κατοπτρισμού σ και σ' προϋποθέτει την ύπαρξη του άξονα C_n.
3. Η ύπαρξη άξονα C_n και επιπέδου συμμετρίας σ που τον περιέχει προϋποθέτει την ύπαρξη n τέτοιων επιπέδων, η τομή των οποίων συμπίπτει με τον άξονα και σχηματίζουν μεταξύ τους γωνία $\varphi=2\pi/n$.
4. Ο συνδυασμός δύο διεργασιών περιστροφής C_2 και C_2', περί δύο αξόνων που σχηματίζουν μεταξύ τους γωνία φ ισοδυναμεί με διεργασία περιστροφής περί άξονα, C_n κατά 2φ (όπου $n=2\pi/2\varphi$). Ο άξονας C_n είναι κάθετος στο επίπεδο που ορίζουν οι δύο άξονες. Με βάση αυτόν τον κανόνα αποδεικνύεται εύκολα ότι η ύπαρξη άξονα C_2 κάθετου σε άξονα C_n προϋποθέτει την ύπαρξη συνολικά n αξόνων C_2.
5. Η ύπαρξη άξονα περιστροφής C_n και ενός επιπέδου κατοπτρισμού σ κάθετου σε αυτόν προϋποθέτει την ύπαρξη άξονα στροφοκατοπτρισμού S_n.
6. Η ύπαρξη άξονα περιστροφής C_{2v} με άρτια τάξη και ενός επιπέδου κατοπτρισμού σ κάθετου σε αυτόν προϋποθέτει την ύπαρξη κέντρου συμμετρίας i, εφόσον $C_{2v}^{\,v}\sigma=\sigma C_{2v}^{\,v}=\sigma C_2=S_2=i$.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει η εφαρμογή των κανόνων αυτών στο παραπάνω παράδειγμα του μορίου PF_5 και μάλιστα στην περίπτωση που έχουν εντοπιστεί μόνο τα στοιχεία συμμετρίας $[C_3, C_2, \sigma_h]$. Κατ' αρχήν η ύπαρξη των C_3 και σ_h οδηγεί στον εντοπισμό του S_3 (κανόνας 5). Η ύπαρξη των C_3 και C_2 προϋποθέτει την ύπαρξη τριών αξόνων δεύτερης τάξης C_2, C_2' και C_2'' που σχηματίζουν μεταξύ τους γωνία 120° (κανόνας 4). Έτσι προκύπτει εύκολα το σύνολο $[E, C_3, C_2, C_2', C_2'', \sigma_h, S_3]$. Στη συνέχεια από τους συνδυασμούς των διεργασιών αυτών προκύπτουν οι διεργασίες κατοπτρισμού που αντιστοιχούν στα στοιχεία συμμετρίας σ_v, σ_v', σ_v''). Στις παρακάτω ενότητες θα δούμε ότι η εύρεση όλων των στοιχείων και διεργασιών συμμετρίας ενός μορίου θα απλοποιηθεί ακόμη περισσότερο.

4.2 Ορισμός των Ομάδων Σημείου

Το πλήρες σύνολο των διεργασιών συμμετρίας ενός μορίου περιγράφει επακριβώς τη συμμετρία ενός μορίου και καλείται *ομάδα συμμετρίας* ή *ομάδα σημείου*. Ο όρος "σημείο" χρησιμοποιείται γιατί, όπως είναι προφανές από τα παραπάνω παραδείγματα, όλα τα στοιχεία συμμετρίας ενός μορίου διέρχονται από ένα κοινό σημείο, το οποίο αποτελεί και το κέντρο μάζας του μορίου. Το σημείο αυτό μπορεί να συμπίπτει ή όχι με τη θέση ενός ατόμου του μορίου και παραμένει ανεπηρέαστο κατά την εφαρμογή οποιασδήποτε διεργασίας συμμετρίας στο μόριο. Ο κανόνας αυτός δεν ισχύει στην περίπτωση μορίων χαμηλής συμμετρίας, όπου τα στοιχεία συμμετρίας τους τέμνονται σε μία γραμμή. Ο όρος "ομάδα" χρησιμοποιείται γιατί όπως θα δειχθεί στη συνέχεια το σύνολο αυτό των διεργασιών αποτελεί μια μαθηματική ομάδα. Η έννοια των όρων "ομάδα" και "σημείο" καθώς και η στενή σχέση της μοριακής συμμετρίας με τη μαθηματική θεωρία των ομάδων θα διευκρινισθεί στο επόμενο κεφάλαιο.

Κάθε δυνατή ομάδα σημείου συνίσταται σε μια σειρά από συγκεκριμένες γενεσιουργές και παράγωγες διεργασίες συμμετρίας. Σε κάθε ομάδα σημείου ανήκουν πολλά και διαφορετικά μόρια και έτσι τα μόρια ταξινομούνται με βάση την ομάδα σημείου στην οποίαν ανήκουν. Η ταξινόμηση αυτή έχει εξαιρετική σημασία καθώς, όπως θα δούμε στη συνέχεια, μας επιτρέπει να μελετήσουμε πολλές από τις ιδιότητές των μορίων που ανήκουν σε μια ομάδα σημείου με μια ενιαία μεθοδολογία.

4.3 Περιγραφή των Ομάδων Σημείου

Οι ομάδες σημείου ταξινομούνται σε τέσσερις κατηγορίες, τις *μη περιστροφικές ομάδες*, τις *περιστροφικές ομάδες μοναδικού άξονα*, τις *διεδρικές* και τις *κυβικές* ομάδες. Σε αυτές προστίθεται η σφαιρική ομάδα η οποία αποτελεί μια ιδιαίτερη περίπτωση. Σε κάθε κατηγορία εντάσσεται μια σειρά από οικογένειες ομάδων σημείου οι οποίες έχουν ως μέλη μια σειρά από συγκεκριμένες ομάδες σημείου. Για παράδειγμα στην κατηγορία *περιστροφικών ομάδων μοναδικού άξονα* εντάσσεται η οικογένεια ομάδων σημείου $\boldsymbol{C_{nv}}$ που έχει ως μέλη τις ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_{2v}}$, $\boldsymbol{C_{3v}}$, $\boldsymbol{C_{4v}}$, $\boldsymbol{C_{5v}}$ και $\boldsymbol{C_{6v}}$. Οι κατηγορίες ομάδων σημείου, οι οικογένειες και τα μέλη τους δίνονται στον *Πίνακα 4.3a*.

Ο συμβολισμός των ομάδων σημείου που χρησιμοποιείται στη μοριακή συμμετρία είναι αυτός του Schoenflies, όπου το σύμβολο που χρησιμοποιείται για κάθε ομάδα είναι δηλωτικό των στοιχείων και διεργασιών συμμετρίας που περιέχει. Στα σύμβολα των ομάδων μοναδικού άξονα και των διεδρικών ομάδων ο δείκτης "n" συμβολίζει την τάξη του κύριου άξονα της ομάδας και λαμβάνει τιμές $n = 2, 3, \ldots, \infty$.

Για να μην συγχέονται οι συμβολισμοί των ομάδων σημείου με εκείνους των διεργασιών συμμετρίας, στα σύμβολα των ομάδων σημείου θα χρησιμοποιούνται έντονοι και πλάγιοι χαρακτήρες (π.χ. $\boldsymbol{C_{2v}}$), σε αντίθεση με τα σύμβολα των διεργασιών συμμετρίας όπου χρησιμοποιούνται έντονοι και πλάγιοι χαρακτήρες μόνο για το σύμβολο της διεργασίας και κανονικοί χαρακτήρες για τους δείκτες (π.χ. $\boldsymbol{C}_2$, $\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{v}$). Υπενθυμίζεται ότι για τα στοιχεία συμμετρίας χρησιμοποιούνται πλάγιοι για το στοιχείο (X) και κανονικοί χαρακτήρες για τους δείκτες (π.χ. C_2, σ_v).

Πίνακας 4.3a Κατηγορίες ομάδων σημείου

Συμβολισμός	Διεργασίες συμμετρίας	Μέλη
Μη περιστροφικές ομάδες		
$\boldsymbol{C_1}$	$\boldsymbol{E}$	$\boldsymbol{C_1}$
$\boldsymbol{C_s}$	$\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{h}$	$\boldsymbol{C_s}$
$\boldsymbol{C_i}$	$\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{i}$	$\boldsymbol{C_i}$

Συνεχίζεται

Συνέχεια

Περιστροφικές ομάδες μοναδικού άξονα		
$\boldsymbol{C_n}$	$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}, \ldots, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}^{\mathrm{n-1}}$	$\boldsymbol{C_2}$ $\boldsymbol{C_3}$ $\boldsymbol{C_4}$ $\boldsymbol{C_5}$ $\boldsymbol{C_6}$ $\boldsymbol{C_7}$ $\boldsymbol{C_8}$
$\boldsymbol{C_{nv}}$	$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}, \ldots, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}^{\mathrm{n-1}}, \mathrm{n}\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v,d}}$	$\boldsymbol{C_{2v}}$ $\boldsymbol{C_{3v}}$ $\boldsymbol{C_{4v}}$ $\boldsymbol{C_{5v}}$ $\boldsymbol{C_{6v}}$
$\boldsymbol{C_{nh}}$	$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}, \ldots, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}^{\mathrm{n-1}}, \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}$	$\boldsymbol{C_{2h}}$ $\boldsymbol{C_{3h}}$ $\boldsymbol{C_{4h}}$ $\boldsymbol{C_{5h}}$ $\boldsymbol{C_{6h}}$
$\boldsymbol{S_{2n}}$	$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{S}_{\mathrm{2n}}, \ldots, \boldsymbol{S}_{\mathrm{2n}}^{\mathrm{2n-1}}$	$\boldsymbol{S_4}$ $\boldsymbol{S_6}$ $\boldsymbol{S_8}$
$\boldsymbol{C_{\infty v}}$	$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{C}_{\infty}^{\varphi}, \infty\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$	$\boldsymbol{C_{\infty v}}$
Διεδρικές ομάδες		
$\boldsymbol{D_n}$	$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}, \ldots, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}^{\mathrm{n-1}}, \mathrm{n}\boldsymbol{C}_2\ (\boldsymbol{C}_2 \perp \boldsymbol{C}\mathrm{n})$	$\boldsymbol{D_2}$ $\boldsymbol{D_3}$ $\boldsymbol{D_4}$ $\boldsymbol{D_5}$ $\boldsymbol{D_6}$
$\boldsymbol{D_{nd}}$	$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}, \ldots, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}^{\mathrm{n-1}}, \mathrm{n}\boldsymbol{C}_2, \mathrm{n}\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}\ (\boldsymbol{C}2 \perp \boldsymbol{C}\mathrm{n})$	$\boldsymbol{D_{2d}}$ $\boldsymbol{D_{3d}}$ $\boldsymbol{D_{4d}}$ $\boldsymbol{D_{5d}}$ $\boldsymbol{D_{6d}}$
$\boldsymbol{D_{nh}}$	$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}, \ldots, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}^{\mathrm{n-1}}, \mathrm{n}\boldsymbol{C}_2, \mathrm{n}\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v,d}}, \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}\ (\boldsymbol{C}_2 \perp \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}})$	$\boldsymbol{D_{2h}}$ $\boldsymbol{D_{3h}}$ $\boldsymbol{D_{4h}}$ $\boldsymbol{D_{5h}}$ $\boldsymbol{D_{6h}}$ $\boldsymbol{D_{8h}}$
$\boldsymbol{D_{\infty h}}$	$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{C}_{\infty}, \boldsymbol{S}_{\infty}, \infty\boldsymbol{C}_2, \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}, \infty\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}, \boldsymbol{i}\ (\boldsymbol{C}_2 \perp \boldsymbol{C}_{\infty})$	$\boldsymbol{D_{\infty h}}$
Κυβικές ομάδες		
$\boldsymbol{T}$	$\boldsymbol{E}, 4\boldsymbol{C}_3, 4\boldsymbol{C}_3^2, 3\boldsymbol{C}_2$	$\boldsymbol{T}$
$\boldsymbol{T_d}$	$\boldsymbol{E}, 8\boldsymbol{C}_3, 3\boldsymbol{C}_2, 6\boldsymbol{S}_4, 6\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}$	$\boldsymbol{T_d}$
$\boldsymbol{T_h}$	$\boldsymbol{E}, 4\boldsymbol{C}_3, 4\boldsymbol{C}_3^2, 3\boldsymbol{C}_2, \boldsymbol{i}, 4\boldsymbol{S}_6, 4\boldsymbol{S}_6^5, 3\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}$	$\boldsymbol{T_h}$
$\boldsymbol{O}$	$\boldsymbol{E}, 8\boldsymbol{C}_3, 3\boldsymbol{C}_2, 6\boldsymbol{C}_4, 6\boldsymbol{C}_2\ (3\boldsymbol{C}_2{=}3\boldsymbol{C}_4^2)$	$\boldsymbol{O}$
$\boldsymbol{O_h}$	$\boldsymbol{E}, 8\boldsymbol{C}_3, 6\boldsymbol{C}_2, 6\boldsymbol{C}_4, 3\boldsymbol{C}_2, \boldsymbol{i}, 6\boldsymbol{S}_4, 8\boldsymbol{S}_6, 3\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{h}}, 6\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}\ (3\boldsymbol{C}_2{=}3\boldsymbol{C}_4^2)$	$\boldsymbol{O_h}$
$\boldsymbol{I}$	$\boldsymbol{E}, 12\boldsymbol{C}_5, 12\boldsymbol{C}_5^2, 20\boldsymbol{C}_3, 15\boldsymbol{C}_2$	$\boldsymbol{I}$
$\boldsymbol{I_h}$	$\boldsymbol{E}, 12\boldsymbol{C}_5, 12\boldsymbol{C}_5^2, 20\boldsymbol{C}_3, 15\boldsymbol{C}_2, \boldsymbol{i}, 12\boldsymbol{S}_{10}, 12\boldsymbol{S}_{10}^3, 20\boldsymbol{S}_6, 15\boldsymbol{\sigma}$	$\boldsymbol{I_h}$
Σφαιρική ομάδα		
$\boldsymbol{K_h}$	$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{C}_{\infty}, \boldsymbol{S}_{\infty}, \boldsymbol{i}$	$\boldsymbol{K_h}$

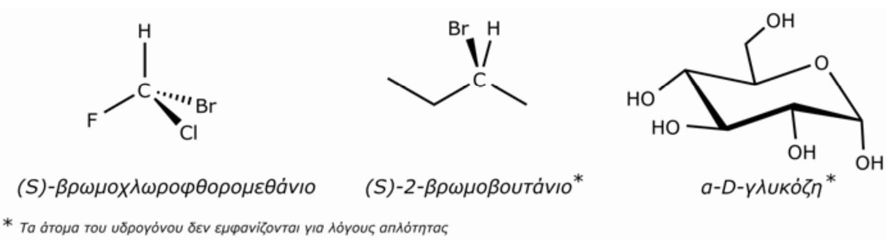
Στη συνέχεια θα παρουσιαστούν όλες οι οικογένειες ομάδων σημείου οι οποίες απαντώνται στη μοριακή συμμετρία ανά κατηγορία. Για κάθε οικογένεια περιγράφονται οι γενεσιουργές και παράγωγες διεργασίες συμμετρίας. Για κάθε ομάδα σημείου μέλος μιας οικογένειας παρατίθενται όλες οι διεργασίες συμμετρίας της καθώς και μια σειρά από αντιπροσωπευτικά μόρια που ανήκουν σε αυτήν.

4.3.1 Μη περιστροφικές ομάδες σημείου: C_1, C_s, C_i

Οι μη περιστροφικές ομάδες χαρακτηρίζονται από την απουσία αξόνων περιστροφής. Τα μόρια που ανήκουν σε αυτές είναι μόρια χαμηλής συμμετρίας. Οι τρεις ομάδες σημείου της κατηγορίας αναλύονται στη συνέχεια.

Ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_1}$. Διεργασίες συμμετρίας: $\boldsymbol{E}$

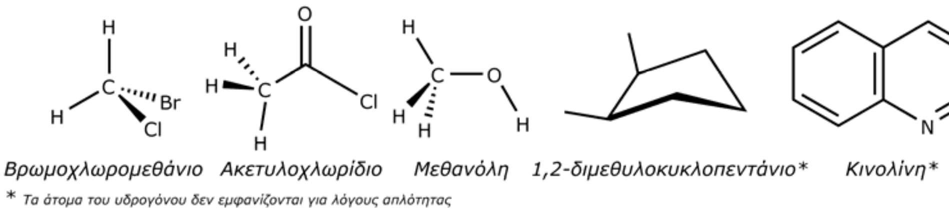
Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_1}$ δεν έχει κανένα στοιχείο συμμετρίας εκτός της ταυτότητας, E. Τα μόρια που ανήκουν σ' αυτήν καλούνται *ασύμμετρα* μόρια. Μερικά τέτοια μόρια δίνονται στο Σχήμα 4.3.1α. Μεταξύ αυτών, κλασικά παραδείγματα αποτελούν οι οργανικές ενώσεις που περιέχουν έναν τετραεδρικό άνθρακα με τέσσερεις διαφορετικούς υποκαταστάτες, όπως το φθοροχλωροβρωμομεθάνιο.



Σχήμα 4.3.1α. Μόρια που ανήκουν στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_1}$

Ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_s}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{\sigma}_h$

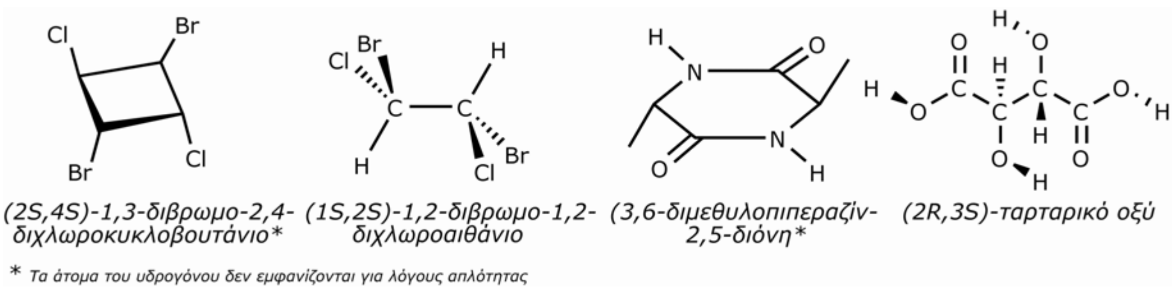
Στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_s}$ ανήκουν αμφίπλευρα αντικείμενα και μόρια, τα οποία έχουν, εκτός της ταυτότητας, E, ένα επίπεδο κατοπτρισμού, σ_h και κανένα άλλο στοιχείο συμμετρίας. Το επίπεδο αυτό διχοτομεί τα τρισδιάστατα μόρια, ενώ τα επίπεδα μόρια κείνται επί αυτού. Μερικά παραδείγματα τέτοιων μορίων δίνονται στο Σχήμα 4.3.1β.



Σχήμα 4.3.1β. Μόρια που ανήκουν στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_s}$

Ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_i}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{i}$

Τα αντικείμενα και τα μόρια που ανήκουν στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_i}$ εκτός από την ταυτότητα, E, έχουν κέντρο αναστροφής, i και κανένα άλλο στοιχείο συμμετρίας. Στην ομάδα $\boldsymbol{C_i}$ κατατάσσεται πολύ μικρός αριθμός μορίων διότι τα περισσότερα κεντροσυμμετρικά μόρια έχουν συνήθως περισσότερα από τα δύο παραπάνω στοιχεία συμμετρίας και συνεπώς υψηλότερη συμμετρία. Μερικά παραδείγματα τέτοιων μορίων δίνονται στο Σχήμα 4.3.1γ.



Σχήμα 4.3.1γ Μόρια που ανήκουν στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_i}$

4.3.2 Περιστροφικές ομάδες μοναδικού άξονα: $\boldsymbol{C_n}$, $\boldsymbol{C_{nv}}$, $\boldsymbol{C_{nh}}$, $\boldsymbol{S_{2n}}$, $\boldsymbol{C_{\infty v}}$

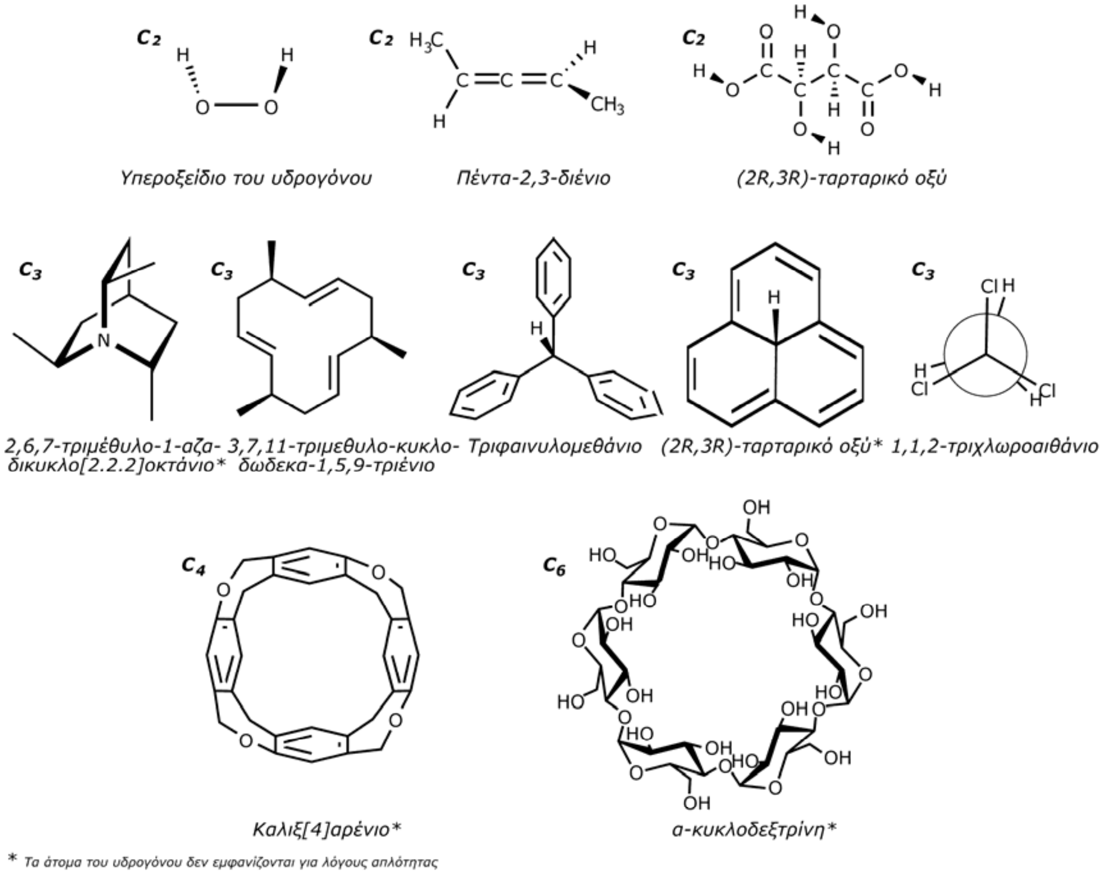
Κοινό χαρακτηριστικό αυτής της κατηγορίας ομάδων σημείου είναι η ύπαρξη ενός μοναδικού άξονα περιστροφής $\boldsymbol{C}_n$ ή στροφοκατοπτρισμού $\boldsymbol{S}_{2n}$. Οι οικογένειες των ομάδων σημείου της κατηγορίας αναλύονται στη συνέχεια.

Ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_n}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{C}_n, \ldots, \boldsymbol{C}_n^{n-1}$

Οι ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_n}$ περιέχουν ως γενεσιουργό διεργασία την κατάλληλη περιστροφή, $\boldsymbol{C}_n$ ($n>1$). Επίσης περιέχουν την ταυτότητα, $\boldsymbol{E}$, καθώς και όλες τις παράγωγες διεργασίες περιστροφής που προκύπτουν από τις δυνάμεις $\boldsymbol{C}_n^m$. Οι διεργασίες συμμετρίας των ομάδων σημείου της οικογένειας δίνονται στον πίνακα που ακολουθεί.

Οικογένεια ομάδων $\boldsymbol{C_n}$	Μέλη						
	$\boldsymbol{C_2}$	$\boldsymbol{C_3}$	$\boldsymbol{C_4}$	$\boldsymbol{C_5}$	$\boldsymbol{C_6}$	$\boldsymbol{C_7}$	$\boldsymbol{C_8}$
Γενεσιουργός διεργασία	$\boldsymbol{C}_2$	$\boldsymbol{C}_3$	$\boldsymbol{C}_4$	$\boldsymbol{C}_5$	$\boldsymbol{C}_6$	$\boldsymbol{C}_7$	$\boldsymbol{C}_8$
Παράγωγες διεργασίες	$\boldsymbol{E}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3^{\,2}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_2$ $(\boldsymbol{C}_4^{\,2})$ $\boldsymbol{C}_4^{\,3}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_5^{\,2}$ $\boldsymbol{C}_5^{\,3}$ $\boldsymbol{C}_5^{\,4}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3$ $(\boldsymbol{C}_6^{\,2})$ $\boldsymbol{C}_2$ $(\boldsymbol{C}_6^{\,3})$ $\boldsymbol{C}_3^{\,2}$ $(\boldsymbol{C}_6^{\,4})$ $\boldsymbol{C}_6^{\,5}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_7^{\,2}$ $\boldsymbol{C}_7^{\,3}$ $\boldsymbol{C}_7^{\,4}$ $\boldsymbol{C}_7^{\,5}$ $\boldsymbol{C}_7^{\,6}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_4$ $(\boldsymbol{C}_8^{\,2})$ $\boldsymbol{C}_8^{\,3}$ $\boldsymbol{C}_2$ $(\boldsymbol{C}_8^{\,4})$ $\boldsymbol{C}_8^{\,5}$ $\boldsymbol{C}_4^{\,3}$ $(\boldsymbol{C}_8^{\,6})$ $\boldsymbol{C}_8^{\,7}$

Τα μόρια που ανήκουν στις ομάδες $\boldsymbol{C_2}$, $\boldsymbol{C_3}$, $\boldsymbol{C_4}$ και $\boldsymbol{C_6}$ είναι ελάχιστα, ενώ δεν υπάρχουν μόρια που ανήκουν στις ομάδες $\boldsymbol{C_4}$, $\boldsymbol{C_7}$ και $\boldsymbol{C_8}$. Μερικά παραδείγματα δίνονται στο *Σχήμα 4.3.2a*.



Σχήμα 4.3.2a Μόρια που ανήκουν στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_n}$

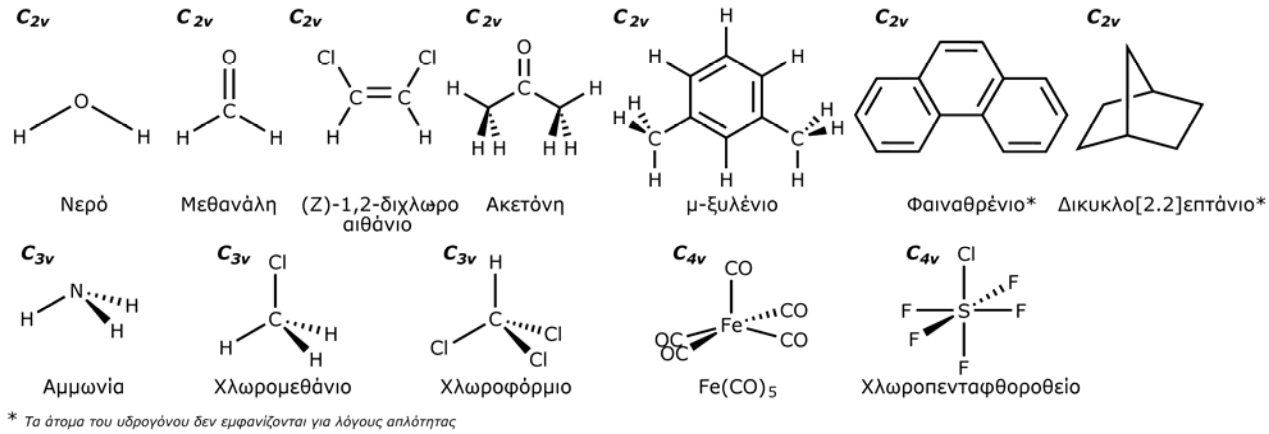
Ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_{nv}}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}, \ldots, \boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}^{\,\mathrm{n-1}}$, $\mathrm{n}\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v,d}}$

Οι ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_{nv}}$ περιέχουν ως γενεσιουργές διεργασίες την κατάλληλη περιστροφή, $\boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}$ (*n>1*), και *n* διεργασίες κατοπτρισμού $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$ ή $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{d}}$. Για την ακρίβεια η γενεσιουργός διεργασία κατοπτρισμού είναι μία, ενώ οι υπόλοιπες *n-1* προκύπτουν από τον συνδυασμό των διεργασιών $\boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}^{\,\mathrm{m}}\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{v}}$. Οι υπόλοιπες διεργασίες συμμετρίας των ομάδων αυτών είναι η ταυτότητα, $\boldsymbol{E}$, και όλες οι παράγωγες διεργασίες περιστροφής που προκύπτουν από τις δυνάμεις $\boldsymbol{C}_{\mathrm{n}}^{\,\mathrm{m}}$. Οι διεργασίες συμμετρίας των ομάδων σημείου της οικογένειας δίνονται στον παρακάτω πίνακα.

Οικογένεια ομάδων $\boldsymbol{C_{nv}}$	Μέλη				
	$\boldsymbol{C_{2v}}$	$\boldsymbol{C_{3v}}$	$\boldsymbol{C_{4v}}$	$\boldsymbol{C_{5v}}$	$\boldsymbol{C_{6v}}$
Γενεσιουργές διεργασίες	$\boldsymbol{C}_2$ $2\boldsymbol{\sigma}_v$	$\boldsymbol{C}_3$ $3\boldsymbol{\sigma}_v$	$\boldsymbol{C}_4$ $2\boldsymbol{\sigma}_v$ $2\boldsymbol{\sigma}_d$	$\boldsymbol{C}_5$ $5\boldsymbol{\sigma}_v$	$\boldsymbol{C}_6$ $3\boldsymbol{\sigma}_v$ $3\boldsymbol{\sigma}_d$
Παράγωγες διεργασίες	$\boldsymbol{E}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3^2$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_2$ $(\boldsymbol{C}_4^2)$ $\boldsymbol{C}_4^3$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_5^2$ $\boldsymbol{C}_5^3$ $\boldsymbol{C}_5^4$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3$ $(\boldsymbol{C}_6^2)$ $\boldsymbol{C}_2$ $(\boldsymbol{C}_6^3)$ $\boldsymbol{C}_3^2$ $(\boldsymbol{C}_6^4)$ $\boldsymbol{C}_6^5$

Τα επίπεδα σ_v ή σ_d σχηματίζουν διαδοχικά μεταξύ τους γωνία *2π/n* και η τομή τους συμπίπτει με τον άξονα C_n. Στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_{nv}}$ με άξονα περιττής τάξης και στην $\boldsymbol{C_{2v}}$ όλα τα επίπεδα συμβολίζονται ως σ_v, ενώ στις ομάδες με άξονα άρτιας τάξης (*n=>4*) υπάρχουν n/2 επίπεδα κατοπτρισμού σ_v και n/2 επίπεδα σ_d. Υπενθυμίζεται, ότι τα επίπεδα σ_v είναι αυτά που διέρχονται από περισσότερα άτομα.

Μερικά παραδείγματα μορίων που ανήκουν στις ομάδες $\boldsymbol{C_{2v}}$, $\boldsymbol{C_{3v}}$ και $\boldsymbol{C_{4v}}$ δίνονται στο *Σχήμα 4.3.2β*, ενώ δεν υπάρχουν μόρια που ανήκουν στις ομάδες $\boldsymbol{C_{5v}}$ και $\boldsymbol{C_{6v}}$.



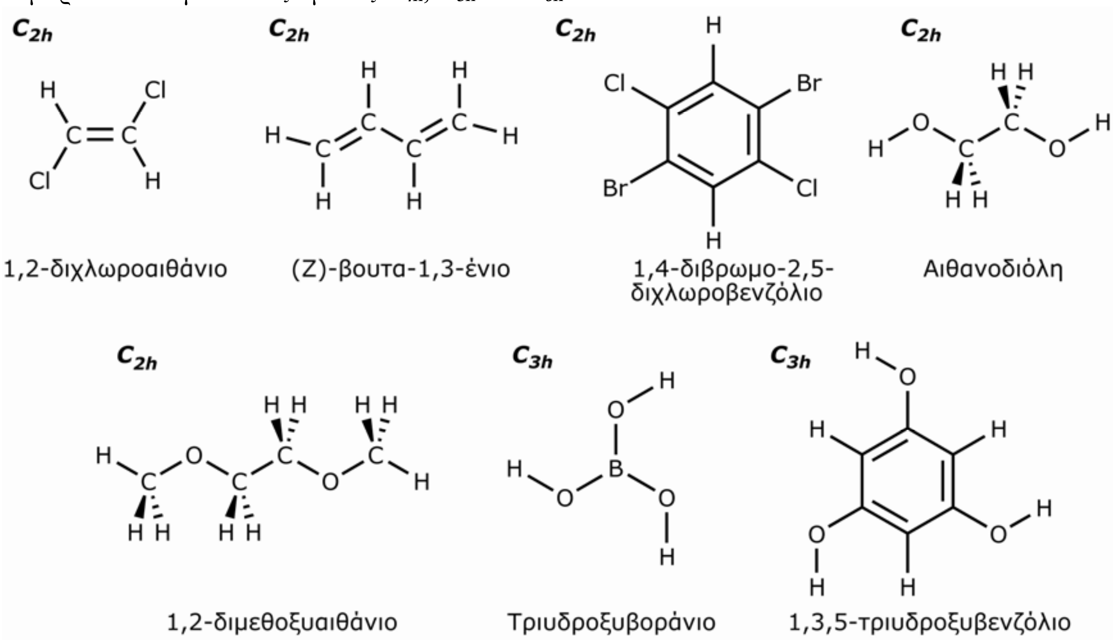
Σχήμα 4.3.2β Μόρια που ανήκουν στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_{nv}}$

Ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_{nh}}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{C}_n, \ldots, \boldsymbol{C}_n^{n-1}$, $\boldsymbol{\sigma}_h$

Οι ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_{nh}}$ περιέχουν ως γενεσιουργές διεργασίες την κατάλληλη περιστροφή περί άξονα, $\boldsymbol{C}_n$ (*n>1*), και μια διεργασία κατοπτρισμού $\boldsymbol{\sigma}_h$ ως προς επίπεδο σ_h κάθετο σε αυτόν. Επειδή $\boldsymbol{\sigma}_h\boldsymbol{C}_n=\boldsymbol{S}_n$ περιέχουν και την παράγωγη διεργασία στροφοκατοπτρισμού $\boldsymbol{S}_n$. Επίσης περιέχουν την ταυτότητα, $\boldsymbol{E}$, και όλες τις παράγωγες κατάλληλες και ακατάλληλες διεργασίες που προκύπτουν από τις δυνάμεις $\boldsymbol{C}_n^m$ και $\boldsymbol{S}_n^m$ και τυχόν συνδυασμούς διεργασιών. Οι ομάδες σημείου με άξονα άρτιας τάξης $\boldsymbol{C_{2h}}$, $\boldsymbol{C_{4h}}$ και $\boldsymbol{C_{6h}}$ περιέχουν επιπλέον και τη διεργασία της αναστροφής, $\boldsymbol{i}$, καθόσον $\boldsymbol{\sigma}_h\boldsymbol{C}_2=\boldsymbol{S}_2=\boldsymbol{i}$. Οι διεργασίες συμμετρίας των ομάδων σημείου της οικογένειας δίνονται στον πίνακα που ακολουθεί.

Οικογένεια ομάδων $\boldsymbol{C_{nh}}$	Μέλη				
	$\boldsymbol{C_{2h}}$	$\boldsymbol{C_{3h}}$	$\boldsymbol{C_{4h}}$	$\boldsymbol{C_{5h}}$	$\boldsymbol{C_{6h}}$
Γενεσιουργές διεργασίες	$\boldsymbol{C}_2$ σ_h	$\boldsymbol{C}_3$ σ_h	$\boldsymbol{C}_4$ σ_h	$\boldsymbol{C}_5$ σ_h	$\boldsymbol{C}_6$ σ_h
Παράγωγες διεργασίες	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{i}$ $(\boldsymbol{S}_2=\sigma_h\boldsymbol{C}_2)$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3^2$ $\boldsymbol{S}_3$ $(\sigma_h\boldsymbol{C}_3)$ $\boldsymbol{S}_3^5$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_2$ $(\boldsymbol{C}_4^2)$ $\boldsymbol{C}_4^3$ $\boldsymbol{S}_4$ $(\sigma_h\boldsymbol{C}_4)$ $\boldsymbol{i}$ $(\boldsymbol{S}_2=\sigma_h\boldsymbol{C}_2)$ $\boldsymbol{S}_4^3$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_5^2$ $\boldsymbol{C}_5^3$ $\boldsymbol{C}_5^4$ $\boldsymbol{S}_5$ $(\sigma_h\boldsymbol{C}_5)$ $\boldsymbol{S}_5^3$ $\boldsymbol{S}_5^7$ $\boldsymbol{S}_5^9$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3$ $(\boldsymbol{C}_6^2)$ $\boldsymbol{C}_2$ $(\boldsymbol{C}_6^3)$ $\boldsymbol{C}_3^2$ $(\boldsymbol{C}_6^4)$ $\boldsymbol{C}_6^5$ $\boldsymbol{S}_6$ $(\sigma_h\boldsymbol{C}_6)$ $\boldsymbol{S}_3$ $(\sigma_h\boldsymbol{C}_3)$ $\boldsymbol{i}$ $(\boldsymbol{S}_2=\sigma_h\boldsymbol{C}_2)$ $\boldsymbol{S}_3^5$ $\boldsymbol{S}_6^5$

Μερικά παραδείγματα μορίων που ανήκουν στις ομάδες $\boldsymbol{C_{2h}}$ και $\boldsymbol{C_{3h}}$ δίνονται στο *Σχήμα 4.3.2γ*, ενώ δεν υπάρχουν μόρια που ανήκουν στις ομάδες $\boldsymbol{C_{4h}}$, $\boldsymbol{C_{5h}}$ και $\boldsymbol{C_{6h}}$.



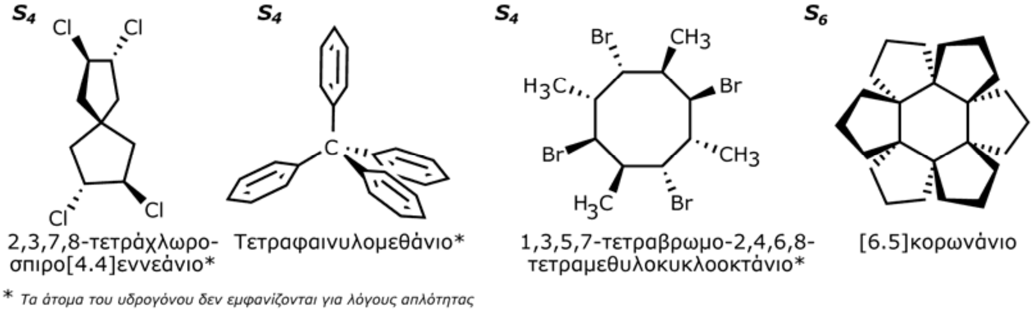
Σχήμα 4.3.2γ Μόρια που ανήκουν στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_{nh}}$

Ομάδες σημείου $\boldsymbol{S_{2n}}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{S}_{2n}$, . . ., $\boldsymbol{S}_{2n}^{2n}$

Οι ομάδες σημείου $\boldsymbol{S_{2n}}$ έχουν ως γενεσιουργή διεργασία την ακατάλληλη περιστροφή άρτιας τάξης, $\boldsymbol{S}_{2n}$ ($n>2$). Επίσης περιέχουν την ταυτότητα, $\boldsymbol{E}$, και όλες τις παράγωγες κατάλληλες και ακατάλληλες διεργασίες που προκύπτουν από τις δυνάμεις $\boldsymbol{S}_{2n}^{m}$. Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{S_6}$ περιέχει επιπλέον και τη διεργασία της αναστροφής, $\boldsymbol{i}$ επειδή $\boldsymbol{S}_6^3=\boldsymbol{S}_2=\boldsymbol{i}$. Οι διεργασίες συμμετρίας των ομάδων σημείου της οικογένειας δίνονται παρακάτω.

Οικογένεια ομάδων $\boldsymbol{S_{2n}}$	Μέλη		
	$\boldsymbol{S_4}$	$\boldsymbol{S_6}$	$\boldsymbol{S_8}$
Γενεσιουργές διεργασίες	$\boldsymbol{S_4}$	$\boldsymbol{S_6}$	$\boldsymbol{S_8}$
Παράγωγες διεργασίες	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C_2}$ ($\boldsymbol{S_4^2}$) $\boldsymbol{S_4^3}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C_3}$ ($\boldsymbol{S_6^2}$) $\boldsymbol{i}$ ($\boldsymbol{S_2}=\boldsymbol{S_6^3}$) $\boldsymbol{C_3^2}$ ($\boldsymbol{S_6^4}$) $\boldsymbol{S_6^5}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C_4}$ ($\boldsymbol{C_8^2}$) $\boldsymbol{S_8^3}$ $\boldsymbol{C_2}$ ($\boldsymbol{S_8^4}$) $\boldsymbol{S_8^5}$ $\boldsymbol{C_4^3}$ ($\boldsymbol{S_8^6}$) $\boldsymbol{S_8^7}$

Εύκολα διαπιστώνεται ότι οι υποθετικές ομάδες σημείου $\boldsymbol{S_1}$, $\boldsymbol{S_2}$ και $\boldsymbol{S_{2n+1}}$ ισοδυναμούν με τις $\boldsymbol{C_s}$, $\boldsymbol{C_i}$ και $\boldsymbol{C_{(2n+1)h}}$ αντιστοίχως. Μερικά παραδείγματα μορίων που ανήκουν στις ομάδες $\boldsymbol{S_4}$ και $\boldsymbol{S_6}$ δίνονται στο *Σχήμα 4.3.2δ* ενώ δεν υπάρχουν μόρια που ανήκουν στην ομάδα $\boldsymbol{S_8}$.

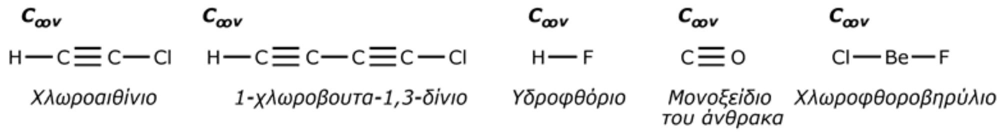


Σχήμα 4.3.2δ Μόρια που ανήκουν στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{S_{2n}}$

Ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_{\infty v}}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{C_\infty^{\varphi}}$, $\infty\boldsymbol{\sigma_v}$

Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_{\infty v}}$ περιέχει ως γενεσιουργές διεργασίες την κατάλληλη περιστροφή απειροστής τάξης, $\boldsymbol{C_\infty^{\varphi}}$ και άπειρο αριθμό διεργασιών κατοπτρισμού $\boldsymbol{\sigma_v}$. Η τομή των επιπέδων σ_v συμπίπτει με τον άξονα C_∞^{φ}. Οι παράγωγες διεργασίες είναι οι $\boldsymbol{C_\infty^{-\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{2\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{-2\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{3\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{-3\varphi}}$, . . . και η ταυτότητα $\boldsymbol{E}$. Οι διεργασίες συμμετρίας της ομάδας σημείου δίνονται παρακάτω.

Ομάδα	$\boldsymbol{C_{\infty v}}$
Γενεσιουργές διεργασίες	$\boldsymbol{C_\infty^{\varphi}}$, $\infty\boldsymbol{\sigma_v}$
Παράγωγες διεργασίες	$\boldsymbol{C_\infty^{-\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{2\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{-2\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{3\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{-3\varphi}}$, . . .



Σχήμα 4.3.2ε Μόρια που ανήκουν στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_{\infty v}}$

Στην ομάδα $\boldsymbol{C_{\infty v}}$ ανήκουν τα μη κεντροσυμμετρικά γραμμικά μόρια, μερικά παραδείγματα εκ των οποίων δίνονται στο *Σχήμα 4.3.2ε*. Ο άξονας C_∞^{φ} συμπίπτει με την ευθεία στην οποία κείται το μόριο που αποτελεί και την τομή των επιπέδων σ_v.

4.3.3 Διεδρικές ομάδες: D_n, D_{nd}, D_{nh}, $D_{\infty h}$

Κοινό χαρακτηριστικό των διεδρικών ομάδων σημείου είναι η ύπαρξη ενός κύριου άξονα περιστροφής C_n και n αξόνων C_2 κάθετων στον κύριο άξονα. Οι οικογένειες των ομάδων σημείου της κατηγορίας αναλύονται στη συνέχεια.

Ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_n}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{C}_n, \ldots, \boldsymbol{C}_n^{n-1}, n\boldsymbol{C}_2\ (\boldsymbol{C}_2 \perp \boldsymbol{C}_n)$

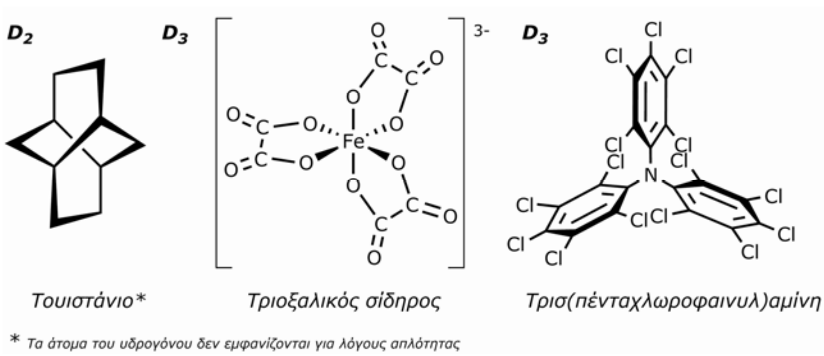
Οι ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_n}$ περιέχουν ως γενεσιουργές διεργασίες την κατάλληλη περιστροφή, $\boldsymbol{C}_n$ ($n>1$) και n διεργασίες περιστροφής $\boldsymbol{C}_2$ περί άξονες C_2 κάθετους στον κύριο άξονα C_n. Επίσης περιέχουν την ταυτότητα, $\boldsymbol{E}$, καθώς και όλες τις παράγωγες διεργασίες περιστροφής που προκύπτουν από τις δυνάμεις $\boldsymbol{C}_n^m$. Οι κάθετοι στον κύριο άξονα C_n άξονες C_2 σχηματίζουν μεταξύ τους διαδοχικές γωνίες $2\pi/n$. Οι διεργασίες συμμετρίας των ομάδων σημείου της οικογένειας δίνονται παρακάτω.

Οικογένεια ομάδων $\boldsymbol{D_n}$	Μέλη				
	$\boldsymbol{D_2}$	$\boldsymbol{D_3}$	$\boldsymbol{D_4}$	$\boldsymbol{D_5}$	$\boldsymbol{D_6}$
Γενεσιουργές διεργασίες	$\boldsymbol{C}_2$ $2\boldsymbol{C}_2$	$\boldsymbol{C}_3$ $3\boldsymbol{C}_2$	$\boldsymbol{C}_4$ $2\boldsymbol{C}_2', 2\boldsymbol{C}_2''$	$\boldsymbol{C}_5$ $5\boldsymbol{C}_2$	$\boldsymbol{C}_6$ $3\boldsymbol{C}_2', 3\boldsymbol{C}_2''$
Παράγωγες διεργασίες	$\boldsymbol{E}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3^2$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_2\ (\boldsymbol{C}_4^2)$ $\boldsymbol{C}_4^3$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_5^2$ $\boldsymbol{C}_5^3$ $\boldsymbol{C}_5^4$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3\ (\boldsymbol{C}_6^2)$ $\boldsymbol{C}_2\ (\boldsymbol{C}_6^3)$ $\boldsymbol{C}_3^2\ (\boldsymbol{C}_6^4)$ $\boldsymbol{C}_6^5$

Στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_n}$ με άρτιο n ($n>2$) οι $n/2$ άξονες C_2 συμβολίζονται ως C_2' και οι υπόλοιποι $n/2$, που διχοτομούν τις γωνίες των C_2, ως C_2''. Οι άξονες C_2' είναι αυτοί που διέρχονται από τα περισσότερα άτομα.

Στην περίπτωση της ομάδας σημείου $\boldsymbol{D_2}$ οι τρεις κάθετοι μεταξύ τους άξονες C_2 είναι ισότιμοι. Έτσι, ο άξονας C_2 που ταυτίζεται με τον καρτεσιανό άξονα z θεωρείται ως ο κύριος άξονας και συμβολίζεται ως $C_2(z)$, ενώ οι άλλοι δύο ως $C_2(x)$ και $C_2(y)$.

Μερικά παραδείγματα μορίων που ανήκουν στις ομάδες $\boldsymbol{D_2}$ και $\boldsymbol{D_3}$ δίνονται στο *Σχήμα 4.3.3α* ενώ δεν υπάρχουν μόρια που ανήκουν στις ομάδες $\boldsymbol{D_4}$, $\boldsymbol{D_5}$ και $\boldsymbol{D_6}$.



Σχήμα 4.3.3α. Μόρια που ανήκουν στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_2}$ και $\boldsymbol{D_3}$

Ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_{nd}}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{C}_n, \ldots, \boldsymbol{C}_n^{n-1}, n\boldsymbol{C}_2, n\boldsymbol{\sigma}_d\ (\boldsymbol{C}_2 \perp \boldsymbol{C}_n)$

Οι ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_{nd}}$ περιέχουν ως γενεσιουργές διεργασίες την κατάλληλη περιστροφή, $\boldsymbol{C}_n$ ($n>1$), n διεργασίες περιστροφής $\boldsymbol{C}_2$ περί n άξονες C_2 κάθετους στον κύριο άξονα C_n και n κατοπτρισμούς $\boldsymbol{\sigma}_d$ ως προς n επίπεδα σ_d. Επίσης οι ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_{nd}}$ περιέχουν την ταυτότητα, $\boldsymbol{E}$, τον στροφοκατοπτρισμό $\boldsymbol{S}_{2n}$ που προκύπτει από συνδυασμούς $\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{\sigma}_d$ και όλες τις παράγωγες διεργασίες περιστροφής που προκύπτουν από τις δυνάμεις $\boldsymbol{C}_n^m$ και $\boldsymbol{S}_{2n}^m$.

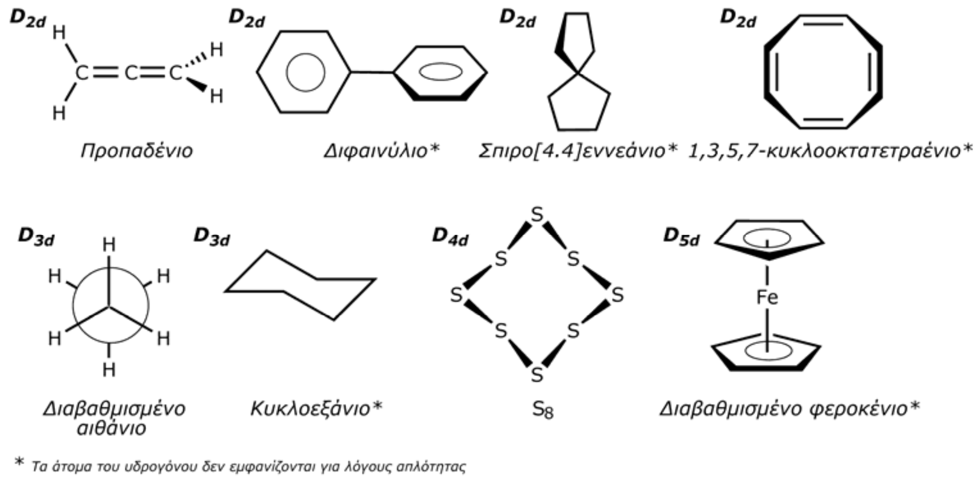
Οι ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_{nd}}$ με περιττό n περιέχουν επιπλέον και τη διεργασία αναστροφής, $\boldsymbol{i}$, αφού $\boldsymbol{S}_{2n}^n = \boldsymbol{S}_2 = \boldsymbol{i}$.

Οι άξονες C_2 που είναι κάθετοι στον κύριο άξονα C_n σχηματίζουν μεταξύ τους διαδοχικές γωνίες *2π/n*. Τα επίπεδα σ_d σχηματίζουν μεταξύ τους διαδοχικές γωνίες *2π/n*, περιέχουν τους άξονες C_2 και η τομή τους συμπίπτει με τον κύριο άξονα. Οι διεργασίες συμμετρίας των ομάδων σημείου της οικογένειας δίνονται στον παρακάτω πίνακα.

Οικογένεια ομάδων $\boldsymbol{D_{nd}}$	Μέλη				
	$\boldsymbol{D_{2d}}$	$\boldsymbol{D_{3d}}$	$\boldsymbol{D_{4d}}$	$\boldsymbol{D_{5d}}$	$\boldsymbol{D_{6d}}$
Γενεσιουργές διεργασίες	$\boldsymbol{C}_2$ $2\boldsymbol{C}_2'$ $2\boldsymbol{\sigma}_d$	$\boldsymbol{C}_3$ $3\boldsymbol{C}_2$ $3\boldsymbol{\sigma}_d$	$\boldsymbol{C}_4$ $4\boldsymbol{C}_2'$ $4\boldsymbol{\sigma}_d$	$\boldsymbol{C}_5$ $5\boldsymbol{C}_2$ $5\boldsymbol{\sigma}_d$	$\boldsymbol{C}_6$ $6\boldsymbol{C}_2'$ $6\boldsymbol{\sigma}_d$
Παράγωγες διεργασίες	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{S}_4\ (\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{\sigma}_d)$ $\boldsymbol{S}_4^{3}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3^{2}$ $\boldsymbol{S}_6\ (\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{\sigma}_d)$ $\boldsymbol{i}\ (\boldsymbol{S}_2=\boldsymbol{S}_6^{3})$ $\boldsymbol{S}_6^{5}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_2\ (\boldsymbol{C}_4^{2})$ $\boldsymbol{C}_4^{3}$ $\boldsymbol{S}_8\ (\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{\sigma}_d)$ $\boldsymbol{S}_8^{3}$ $\boldsymbol{S}_8^{5}$ $\boldsymbol{S}_8^{7}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_5^{2}$ $\boldsymbol{C}_5^{3}$ $\boldsymbol{C}_5^{4}$ $\boldsymbol{S}_{10}\ (\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{\sigma}_d)$ $\boldsymbol{S}_{10}^{3}$ $\boldsymbol{i}\ (\boldsymbol{S}_2=\boldsymbol{S}_{10}^{5})$ $\boldsymbol{S}_{10}^{7}$ $\boldsymbol{S}_{10}^{9}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3\ (\boldsymbol{C}_6^{2})$ $\boldsymbol{C}_2\ (\boldsymbol{C}_6^{3})$ $\boldsymbol{C}_3^{2}\ (\boldsymbol{C}_6^{4})$ $\boldsymbol{C}_6^{5}$ $\boldsymbol{S}_{12}\ (\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{\sigma}_d)$ $\boldsymbol{S}_4\ (\boldsymbol{S}_{12}^{3})$ $\boldsymbol{S}_{12}^{5}$ $\boldsymbol{S}_{12}^{7}$ $\boldsymbol{S}_4^{3}\ (\boldsymbol{S}_{12}^{9})$ $\boldsymbol{S}_{12}^{11}$

Στις περιπτώσεις των ομάδων $\boldsymbol{D_{nd}}$ με άρτιο *n* (*n>2*) προκύπτει και ένας επιπλέον άξονας C_2. Ο άξονας αυτός αποτελεί το στοιχείο συμμετρίας της παράγωγης διεργασίας περιστροφής $\boldsymbol{C}_2=\boldsymbol{C}_n^{n/2}$, συμπίπτει με τον κύριο άξονα C_n και συμβολίζεται απλά ως C_2. Οι υπόλοιποι άξονες δεύτερης τάξης συμβολίζονται ως C_2'. Στην περίπτωση της ομάδας σημείου $\boldsymbol{D_{2d}}$ οι τρεις κάθετοι μεταξύ τους άξονες C_2 είναι ισότιμοι. Ωστόσο, ο άξονας που ταυτίζεται με τον καρτεσιανό άξονα *z* συμβολίζεται ως C_2 και οι άλλοι δύο ως C_2'.

Μερικά παραδείγματα μορίων που ανήκουν στις ομάδες $\boldsymbol{D_{2d}}$, $\boldsymbol{D_{3d}}$, $\boldsymbol{D_{4d}}$ και $\boldsymbol{D_{5d}}$ δίνονται στο *Σχήμα 4.3.3β*,ενώ



Σχήμα 4.3.3β Μόρια που ανήκουν στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_{nd}}$

δεν υπάρχουν μόρια που ανήκουν στην ομάδα $\boldsymbol{D_{6d}}$.

Ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_{nh}}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{C}_n, \ldots, \boldsymbol{C}_n^{n-1}$, $n\boldsymbol{C}_2$, $n\boldsymbol{\sigma}_{v,d}$, $\boldsymbol{\sigma}_h$ $(\boldsymbol{C}_2 \perp \boldsymbol{C}_n)$

Οι ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_{nh}}$ περιέχουν ως γενεσιουργές διεργασίες την κατάλληλη περιστροφή, $\boldsymbol{C}_n$ (*n>1*), τις *n* διεργασίες περιστροφής $\boldsymbol{C}_2$ περί *n* άξονες C_2 κάθετους στον κύριο άξονα C_n, τους *n* κατοπτρισμούς $\boldsymbol{\sigma}_{v,d}$ ως προς *n* επίπεδα $\sigma_{v,d}$ και τον κατοπτρισμό $\boldsymbol{\sigma}_h$ ως προς επίπεδο σ_h. Επίσης οι ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_{nh}}$ περιέχουν την ταυτότητα,

$\boldsymbol{E}$, τον στροφοκατοπτρισμό $\boldsymbol{S}_n$ που προκύπτει από το συνδυασμό $\boldsymbol{\sigma}_h\boldsymbol{C}_n$ και όλες τις παράγωγες διεργασίες περιστροφής που προκύπτουν από τις δυνάμεις $\boldsymbol{C}_n^m$ και $\boldsymbol{S}_n^m$. Οι ομάδες με άρτιο *n* περιέχουν επιπλέον και τη διεργασία αναστροφής, $\boldsymbol{i}$, αφού $\boldsymbol{S}_n^{n/2}=\boldsymbol{\sigma}_h\boldsymbol{C}_n^{n/2}=\boldsymbol{\sigma}_h\boldsymbol{C}_2=\boldsymbol{S}_2=\boldsymbol{i}$.

Οι άξονες C_2 που είναι κάθετοι στον κύριο άξονα C_n σχηματίζουν μεταξύ τους διαδοχικές γωνίες *2π/n*. Τα επίπεδα $\boldsymbol{\sigma}_{v,d}$ σχηματίζουν μεταξύ τους διαδοχικές γωνίες *2π/n*, περιέχουν τους άξονες C_2 και η τομή τους συμπίπτει με τον κύριο άξονα. Οι διεργασίες συμμετρίας των ομάδων σημείου της οικογένειας δίνονται παρακάτω.

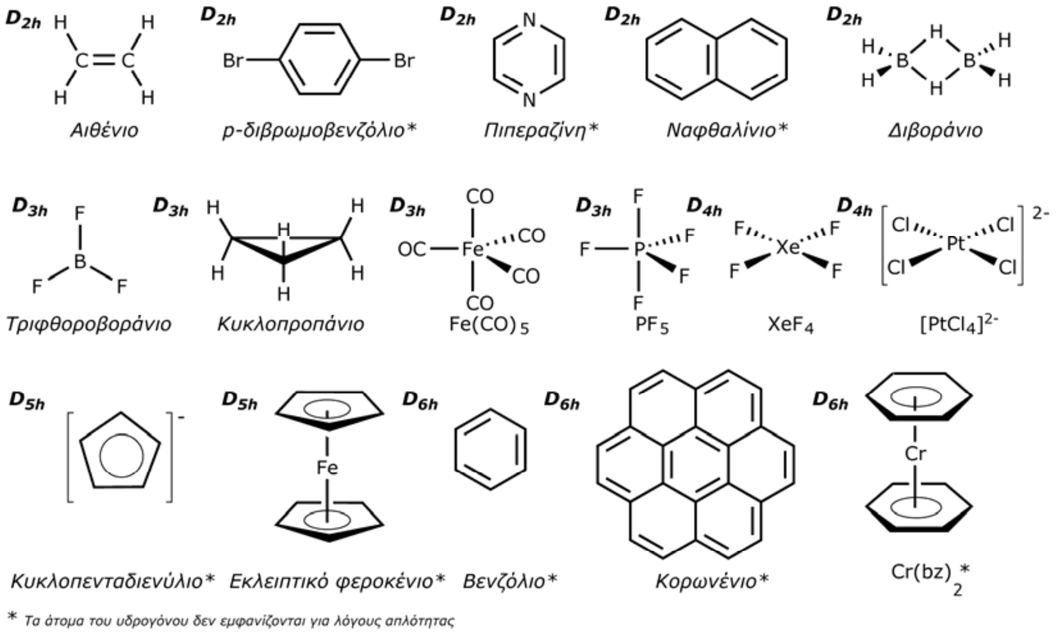
Οικογένεια ομάδων $\boldsymbol{D}_{nh}$	Μέλη					
	$\boldsymbol{D}_{2h}$	$\boldsymbol{D}_{3h}$	$\boldsymbol{D}_{4h}$	$\boldsymbol{D}_{5h}$	$\boldsymbol{D}_{6h}$	$\boldsymbol{D}_{8h}$
Γενεσιουργές διεργασίες	$\boldsymbol{C}_2(z)$ $\boldsymbol{C}_2(x)$, $\boldsymbol{C}_2(y)$ $\boldsymbol{\sigma}(xz)$, $\boldsymbol{\sigma}(yz)$, $\boldsymbol{\sigma}(xy)$	$\boldsymbol{C}_3$ $3\boldsymbol{C}_2$ $3\boldsymbol{\sigma}_v$ $\boldsymbol{\sigma}_h$	$\boldsymbol{C}_4$ $2\boldsymbol{C}_2'$, $2\boldsymbol{C}_2''$ $2\boldsymbol{\sigma}_v$ $2\boldsymbol{\sigma}_d$ $\boldsymbol{\sigma}_h$	$\boldsymbol{C}_5$ $5\boldsymbol{C}_2$ $5\boldsymbol{\sigma}_v$ $\boldsymbol{\sigma}_h$	$\boldsymbol{C}_6$ $3\boldsymbol{C}_2'$, $3\boldsymbol{C}_2''$ $3\boldsymbol{\sigma}_v$ $3\boldsymbol{\sigma}_d$ $\boldsymbol{\sigma}_h$	$\boldsymbol{C}_8$ $4\boldsymbol{C}_2'$, $3\boldsymbol{C}_2''$ $4\boldsymbol{\sigma}_v$ $4\boldsymbol{\sigma}_d$ $\boldsymbol{\sigma}_h$
Παράγωγες διεργασίες	$\boldsymbol{E}$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3^2$ $\boldsymbol{S}_3$ $(\boldsymbol{C}_3\boldsymbol{\sigma}_h)$ $\boldsymbol{S}_3^2$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_2$ $(\boldsymbol{C}_4^2)$ $\boldsymbol{C}_4^3$ $\boldsymbol{S}_4$ $(\boldsymbol{C}_4\boldsymbol{\sigma}_h)$ $\boldsymbol{S}_4^3$ $\boldsymbol{i}$ $(\boldsymbol{S}_2=\boldsymbol{\sigma}_h\boldsymbol{C}_2)$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_5^2$ $\boldsymbol{C}_5^3$ $\boldsymbol{C}_5^4$ $\boldsymbol{S}_5$ $(\boldsymbol{C}_5\boldsymbol{\sigma}_h)$ $\boldsymbol{S}_5^3$ $\boldsymbol{S}_{10}^7$ $\boldsymbol{S}_{10}^9$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_3$ $(\boldsymbol{C}_6^2)$ $\boldsymbol{C}_2$ $(\boldsymbol{C}_6^3)$ $\boldsymbol{C}_3^2$ $(\boldsymbol{C}_6^4)$ $\boldsymbol{C}_6^5$ $\boldsymbol{S}_3$ $(\boldsymbol{C}_3\boldsymbol{\sigma}_h)$ $\boldsymbol{S}_3^5$ $\boldsymbol{S}_6$ $(\boldsymbol{C}_6\boldsymbol{\sigma}_h)$ $\boldsymbol{S}_6^5$ $\boldsymbol{i}$ $(\boldsymbol{S}_2=\boldsymbol{\sigma}_h\boldsymbol{C}_2)$	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_4$ $(\boldsymbol{C}_8^2)$ $\boldsymbol{C}_8^3$ $\boldsymbol{C}_2$ $(\boldsymbol{C}_8^4)$ $\boldsymbol{C}_8^5$ $\boldsymbol{C}_4^3$ $(\boldsymbol{C}_8^6)$ $\boldsymbol{C}_8^7$ $\boldsymbol{S}_4$ $(\boldsymbol{C}_4\boldsymbol{\sigma}_h)$ $\boldsymbol{S}_4^3$ $\boldsymbol{S}_8$ $(\boldsymbol{C}_8\boldsymbol{\sigma}_h)$ $\boldsymbol{S}_8^3$ $\boldsymbol{S}_8^5$ $\boldsymbol{S}_8^7$ $\boldsymbol{i}$ $(\boldsymbol{S}_2=\boldsymbol{\sigma}_h\boldsymbol{C}_2)$

Στις ομάδες $\boldsymbol{D}_{nh}$ με άξονα περιττής τάξης όλα τα κατακόρυφα επίπεδα συμβολίζονται ως σ_v, ενώ στις ομάδες με άξονα άρτιας τάξης ($n>2$) υπάρχουν *n/2* επίπεδα κατοπτρισμού σ_v και *n/2* επίπεδα σ_d. Τα επίπεδα σ_v είναι αυτά που διέρχονται από τα περισσότερα άτομα.

Στις περιπτώσεις των ομάδων $\boldsymbol{D}_{nh}$ με άρτιο *n* ($n>2$) προκύπτει και ένας επιπλέον άξονας C_2. Ο άξονας αυτός αποτελεί το στοιχείο συμμετρίας της παράγωγης διεργασίας περιστροφής $\boldsymbol{C}_2=\boldsymbol{C}_n^{n/2}$, συμπίπτει με τον κύριο άξονα C_n και συμβολίζεται απλά ως C_2. Από τους *n*, κάθετους στον κύριο άξονα C_n, άξονες C_2 οι *n/2* άξονες C_2 που διέρχονται από τα περισσότερα άτομα συμβολίζονται ως C_2' και οι υπόλοιποι n/2 ως C_2''. Τα *n/2* επίπεδα σ_v περιέχουν τον C_n και έναν C_2', ενώ τα *n/2* επίπεδα σ_d περιέχουν τον C_n και έναν C_2''.

Στην περίπτωση της ομάδας σημείου $\boldsymbol{D}_{2h}$ οι τρεις κάθετοι μεταξύ τους άξονες C_2 είναι ισότιμοι. Έτσι, ο(.Ο) άξονας που ταυτίζεται με τον καρτεσιανό άξονα *z* συμβολίζεται ως $C_2(z)$ και οι άλλοι δύο ως $C_2(x)$ και $C_2(y)$. Τα δύο κατακόρυφα επίπεδα ($2\sigma_v$) συμβολίζονται ως $\sigma(xz)$ και $\sigma(yz)$ και το οριζόντιο επίπεδο σ_h ως $\sigma(xy)$.

Μερικά παραδείγματα μορίων που ανήκουν στις ομάδες $\boldsymbol{D}_{2h}$, $\boldsymbol{D}_{3h}$, $\boldsymbol{D}_{4h}$, $\boldsymbol{D}_{5h}$ και $\boldsymbol{D}_{6h}$ δίνονται στο *Σχήμα 4.3.3γ*, ενώ δεν υπάρχουν μόρια που ανήκουν στην ομάδα $\boldsymbol{D}_{8h}$.



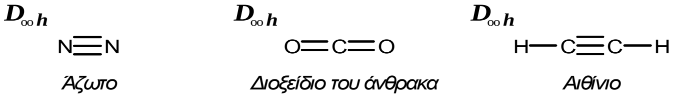
Σχήμα 4.3.3γ Μόρια που ανήκουν στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{D}_{nh}$

Ομάδα σημείου $\boldsymbol{D}_{\infty h}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{C}_\infty^{\varphi}$, $\infty\boldsymbol{C}_2$, $\infty\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{v}$, $\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{h}$ ($\boldsymbol{C}_2 \perp \boldsymbol{C}_\infty^{\varphi}$)

Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{D}_{\infty h}$ περιέχει ως γενεσιουργές διεργασίες την κατάλληλη περιστροφή απειροστής τάξης, $\boldsymbol{C}_\infty^{\varphi}$, τις διεργασίες περιστροφής $\boldsymbol{C}_2$ περί άπειρους άξονες C_2 κάθετους στον κύριο άξονα C_∞^{φ}, τους κατοπτρισμούς $\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{v}$ ως προς άπειρα επίπεδα σ_v και τον κατοπτρισμό $\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{h}$ ως προς επίπεδο σ_h. Επίσης περιέχει την ταυτότητα, $\boldsymbol{E}$, τον στροφοκατοπτρισμό απειροστής τάξης $\boldsymbol{S}_\infty^{\varphi}$ που προκύπτει από το συνδυασμό $\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{h}\boldsymbol{C}_\infty^{\varphi}$ και όλες τις παράγωγες διεργασίες περιστροφής που προκύπτουν από τις δυνάμεις των αξόνων, δηλαδή $\boldsymbol{C}_\infty^{-\varphi}$, $\boldsymbol{C}_\infty^{2\varphi}$, $\boldsymbol{C}_\infty^{-2\varphi}$, $\boldsymbol{C}_\infty^{3\varphi}$, $\boldsymbol{C}_\infty^{-3\varphi}$, . . . και $\boldsymbol{S}_\infty^{-\varphi}$, $\boldsymbol{S}_\infty^{2\varphi}$, $\boldsymbol{S}_\infty^{-2\varphi}$, $\boldsymbol{S}_\infty^{3\varphi}$, $\boldsymbol{S}_\infty^{-3\varphi}$, . . . και κέντρο συμμετρίας $\boldsymbol{i}$. Οι διεργασίες συμμετρίας της ομάδας σημείου δίνονται παρακάτω.

Ομάδα	$\boldsymbol{D}_{\infty h}$
Γενεσιουργές διεργασίες	$\boldsymbol{C}_\infty^{\varphi}$, $\boldsymbol{S}_\infty^{\varphi}$, $\infty\boldsymbol{C}_2$, $\infty\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{v}$
Παράγωγες διεργασίες	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C}_\infty^{-\varphi}$, $\boldsymbol{C}_\infty^{2\varphi}$, $\boldsymbol{C}_\infty^{-2\varphi}$, $\boldsymbol{C}_\infty^{3\varphi}$, $\boldsymbol{C}_\infty^{-3\varphi}$, . . . $\boldsymbol{S}_\infty^{-\varphi}$, $\boldsymbol{S}_\infty^{2\varphi}$, $\boldsymbol{S}_\infty^{-2\varphi}$, $\boldsymbol{S}_\infty^{3\varphi}$, $\boldsymbol{S}_\infty^{-3\varphi}$, . . . $\boldsymbol{i}$

Στην ομάδα $\boldsymbol{D}_{\infty h}$ ανήκουν τα κεντροσυμμετρικά γραμμικά μόρια μερικά παραδείγματα εκ των οποίων δίνονται στο *Σχήμα 4.3.3δ*. Οι άξονες C_∞^{φ} και S_∞^{φ} συμπίπτουν με την ευθεία στην οποία κείται το μόριο που αποτελεί και την τομή των επιπέδων σ_v. Το κέντρο αναστροφής, i, ταυτίζεται με το μέσον του μήκους του μορίου και το σ_h διέρχεται από το κέντρο αναστροφής και είναι κάθετο στον C_∞^{φ}.



Σχήμα 4.3.3δ. Μόρια που ανήκουν στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{D}_{\infty h}$

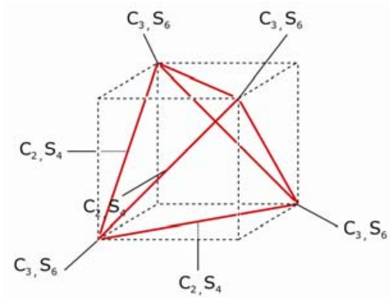
4.3.4 Κυβικές ομάδες: *T, T$_h$, T$_d$, O, O$_h$, I, I$_h$*

Κοινό χαρακτηριστικό των κυβικών ομάδων σημείου είναι η ύπαρξη πολλαπλών αξόνων περιστροφής C_n υψηλής τάξης ($n>2$). Σε αυτές τις ομάδες σημείου ανήκουν τα πέντε πλατωνικά στερεά: *τετράεδρο*, *κύβος*, *οκτάεδρο*, *δωδεκάεδρο* και *εικοσάεδρο*, που φαίνονται στο *Σχήμα 4.3.4.a*. Οι έδρες των στερεών αυτών είναι κανονικά πολύγωνα (τρίγωνα, τετράγωνα, πεντάγωνα ή εξάγωνα) και όλες οι κορυφές, ακμές και έδρες είναι ισοδύναμες μεταξύ τους. Τα μόρια ή γεωμετρικά σχήματα που ανήκουν σε αυτές τις ομάδες έχουν άμεση σχέση με τα στερεά αυτά.

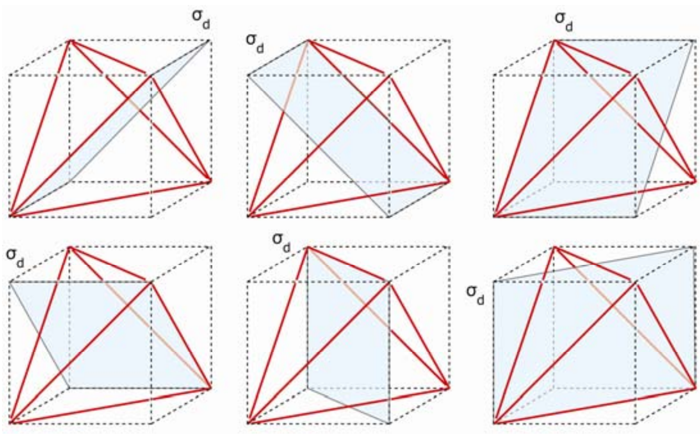
Σχήμα 4.3.4α Τα πέντε πλατωνικά στερεά

Ομάδες σημείου: $\boldsymbol{T}$, $\boldsymbol{T_h}$, $\boldsymbol{T_d}$

Στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{T_d}$ ανήκει ένα από τα πλατωνικά στερεά, το τετράεδρο. Για την ευκολότερη αναγνώριση των στοιχείων και διεργασιών συμμετρίας της είναι χρήσιμη η σχέση του τετραέδρου με τον κύβο. Συγκεκριμένα, το τετράεδρο είναι το στερεό με τέσσερις κορυφές που ταυτίζονται με ισάριθμες κορυφές του κύβου όπως φαίνεται στο *Σχήμα 4.3.4β-1*.



1



2

Σχήμα 4.3.4β Ορισμός του τετραέδρου με βάση τον κύβο και στοιχεία συμμετρίας της ομάδας σημείου $\boldsymbol{T_d}$

Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{T_d}$ περιέχει εκτός της ταυτότητας τα παρακάτω στοιχεία και διεργασίες συμμετρίας:

- τέσσερις άξονες περιστροφής C_3 που συμπίπτουν με τις διαγώνιες του κύβου και σχηματίζουν ανά δύο γωνία ~109.5° και αντιστοιχούν στις διεργασίες $4\boldsymbol{C_3}$ και $4\boldsymbol{C_3}^2$ (*Σχήμα 4.3.4β-1*).
- τρεις κάθετους μεταξύ τους άξονες περιστροφής C_2 που συνδέουν τα κέντρα των απέναντι ακμών του τετραέδρου ή τα κέντρα των απέναντι πλευρών του κύβου και αντιστοιχούν στις διεργασίες $3\boldsymbol{C_2}$ (*Σχήμα 4.3.4β-1*).
- τρεις κάθετους μεταξύ τους άξονες στροφοκατοπτρισμού S_4 που συμπίπτουν με τους άξονες C_2 και αντιστοιχούν στις διεργασίες $3\boldsymbol{S_4}$ και $3\boldsymbol{S_4}^3$ (*Σχήμα 4.3.4β-1*).
- έξι επίπεδα κατοπτρισμού σ_d που καθορίζονται από τα ζεύγη των διαγωνίως απέναντι ακμών του κύβου και αντιστοιχούν στις διεργασίες $6\boldsymbol{\sigma}_d$ (*Σχήμα 4.3.4β-2*).

Έτσι, το σύνολο των διεργασιών της ομάδας σημείου $\boldsymbol{T_d}$ είναι:

Ομάδα σημείου $\boldsymbol{T_d}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $4\boldsymbol{C_3}$, $4\boldsymbol{C_3}^2$, $3\boldsymbol{C_2}$, $3\boldsymbol{S_4}$, $3\boldsymbol{S_4}^3$, $6\boldsymbol{\sigma}_d$

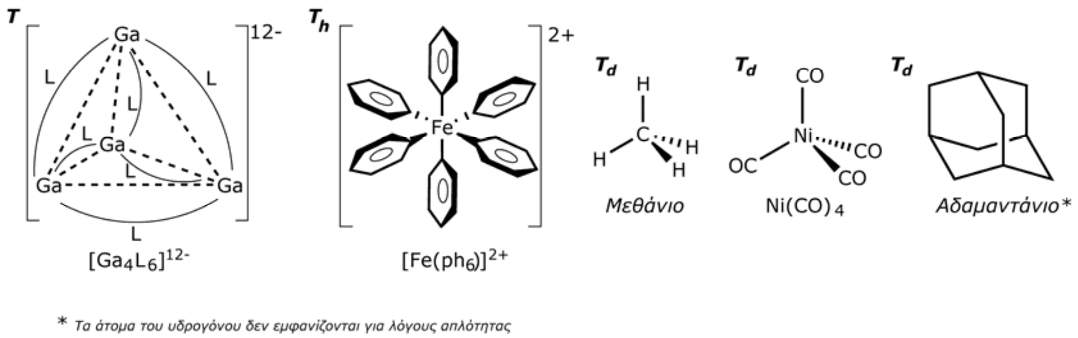
Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{T}$ περιέχει μόνο τις κατάλληλες και ακατάλληλες περιστροφές της ομάδας σημείου $\boldsymbol{T_d}$, δηλαδή:

Ομάδα σημείου $\boldsymbol{T}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $4\boldsymbol{C_3}$, $4\boldsymbol{C_3}^2$, $3\boldsymbol{C_2}$, $3\boldsymbol{S_4}$, $3\boldsymbol{S_4}^3$

Τέλος, η προσθήκη στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{T}$ τριών επιπέδων κατοπτρισμού σ_h οδηγεί στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{T_h}$. Τα επίπεδα αυτά καθορίζονται από τα ζεύγη των αξόνων C_2. Ο συνδυασμός των διεργασιών $\boldsymbol{\sigma}_h$ με τις άλλες διεργασίες της ομάδας έχει σαν αποτέλεσμα τέσσερις επιπλέον διεργασίες $\boldsymbol{S_6}$ (*Σχήμα 4.3.4β-6*), από τις οποίες προκύπτουν ισάριθμες διεργασίες $\boldsymbol{S_6}^5$, καθώς και η διεργασία $\boldsymbol{i}$ καθόσον $\boldsymbol{\sigma}_h\boldsymbol{C_2}=\boldsymbol{S_2}=\boldsymbol{i}$. Έτσι, το σύνολο των διεργασιών της ομάδας σημείου $\boldsymbol{T_h}$ είναι:

Ομάδα σημείου $\boldsymbol{T_h}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $4\boldsymbol{C_3}$, $4\boldsymbol{C_3}^2$, $3\boldsymbol{C_2}$, $\boldsymbol{i}$, $4\boldsymbol{S_6}$, $4\boldsymbol{S_6}^5$, $3\boldsymbol{\sigma}_h$

Στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{T_d}$ ανήκουν πολλά μόρια, ενώ ελάχιστα είναι αυτά που ανήκουν στις $\boldsymbol{T}$ και $\boldsymbol{T_h}$. Μερικά παραδείγματα δίνονται στο *Σχήμα 4.3.4.γ*.

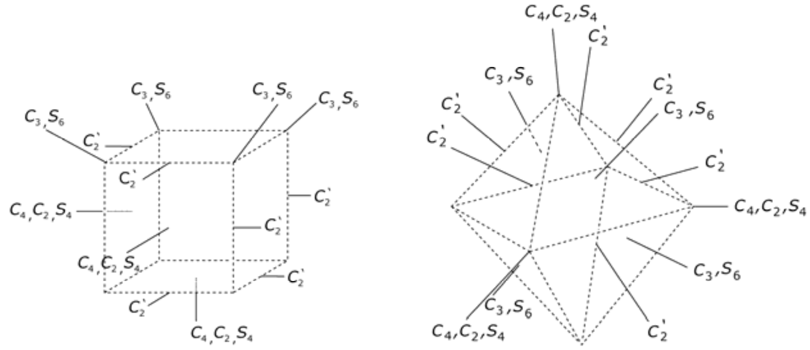


Σχήμα 4.3.4γ Μόρια που ανήκουν στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{T_d}$, $\boldsymbol{T}$ και $\boldsymbol{T_h}$

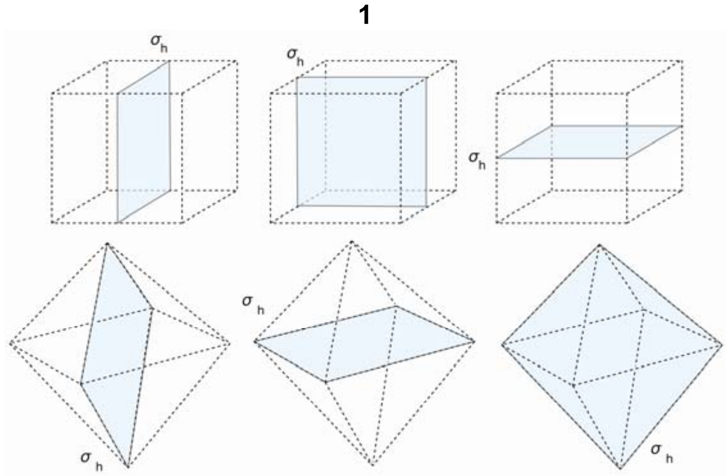
Ομάδες σημείου: $\boldsymbol{O}$, $\boldsymbol{O_h}$

Στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{O_h}$ ανήκουν τα πλατωνικά στερεά του κύβου και του οκταέδρου. Εκτός της ταυτότητας περιέχει τα παρακάτω στοιχεία και διεργασίες συμμετρίας :

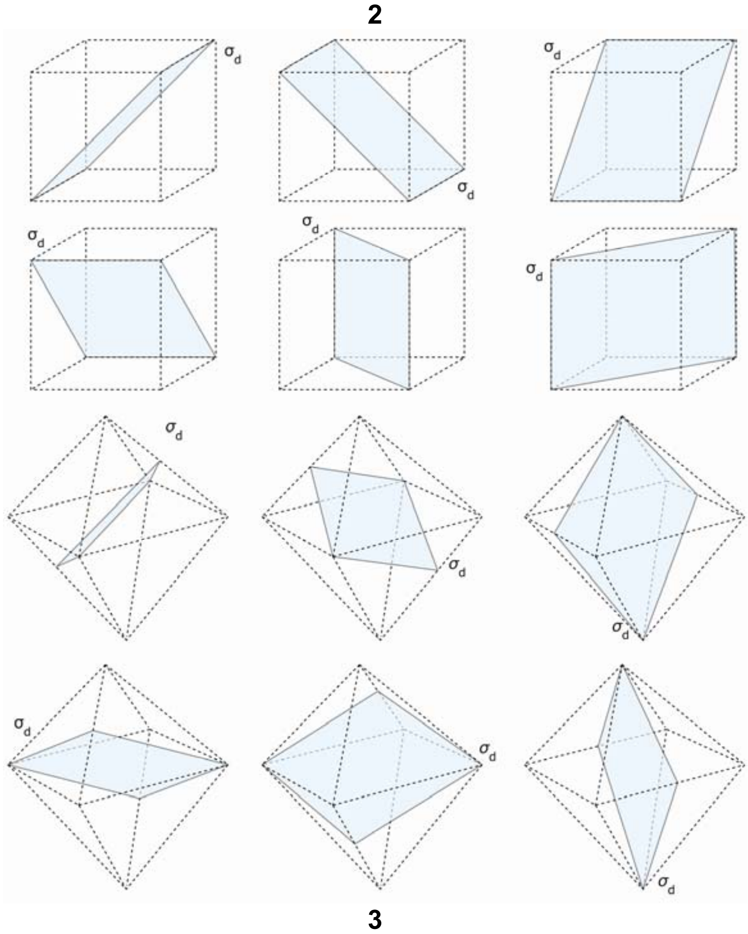
- τρεις άξονες περιστροφής C_4 κάθετους μεταξύ τους που διέρχονται από τα κέντρα απέναντι εδρών στον κύβο ή απέναντι κορυφών στο οκτάεδρο και αντιστοιχούν στις διεργασίες $3\boldsymbol{C_4}$ και $3\boldsymbol{C_4}^3$ (*Σχήμα 4.3.4δ-1*).
- τέσσερις άξονες περιστροφής C_3 που διέρχονται από τα μέσα απέναντι κορυφών στον κύβο ή εδρών στο οκτάεδρο και αντιστοιχούν στις διεργασίες $4\boldsymbol{C_3}$ και $4\boldsymbol{C_3}^2$ (*Σχήμα 4.3.4δ-1*).
- τρεις άξονες περιστροφής C_2 που συμπίπτουν με τους άξονες C_4 και αντιστοιχούν στις διεργασίες $3\boldsymbol{C_2}$ (*Σχήμα 4.3.4δ-1*).
- έξι άξονες περιστροφής C_2' κάθετους μεταξύ τους που διέρχονται από τα μέσα απέναντι ακμών τόσο στον κύβο όσο και στο οκτάεδρο και αντιστοιχούν στις διεργασίες $6\boldsymbol{C_2}'$ (*Σχήμα 4.3.4δ-1*).
- τέσσερις άξονες στροφοκατοπτρισμού S_6 που συμπίπτουν με τους C_3 και αντιστοιχούν στις διεργασίες $4\boldsymbol{S_6}$ και $4\boldsymbol{S_6}^5$ (*Σχήμα 4.3.4δ-1*).
- τρεις άξονες στροφοκατοπτρισμού S_4 κάθετους μεταξύ τους που συμπίπτουν με τους άξονες C_4 και αντιστοιχούν στις διεργασίες $3\boldsymbol{S_4}$, $3\boldsymbol{S_4}^3$ και $3\boldsymbol{C_2}$ ($3\boldsymbol{S_4}^2$)(*Σχήμα 4.3.4δ-1*).
- τρία επίπεδα κατοπτρισμού σ_h που καθορίζονται από τα μέσα τεσσάρων ακμών στον κύβο ή τεσσάρων κορυφών του οκταέδρου και αντιστοιχούν στις διεργασίες $3\boldsymbol{\sigma}_h$ (*Σχήμα 4.3.4δ-2*).
- έξι επίπεδα κατοπτρισμού σ_d που καθορίζονται από δύο απέναντι ακμές στον κύβο ή διέρχονται από δύο απέναντι κορυφές και διχοτομούν δύο απέναντι ακμές στο οκτάεδρο. Αυτά τα επίπεδα κατοπτρισμού σ_d αντιστοιχούν στις διεργασίες $6\boldsymbol{\sigma}_d$. (*Σχήμα 4.3.4δ-3*).



1



2



3

Σχήμα 4.3.4δ Στοιχεία συμμετρίας της ομάδας σημείου $\boldsymbol{O_h}$ στον κύβο και το οκτάεδρο

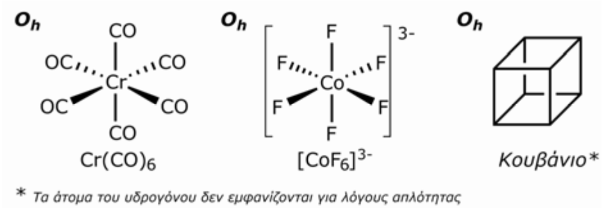
- το κέντρο συμμετρίας *i* που συμπίπτει με το κέντρο μάζας του κύβου και του οκταέδρου, αποτελεί το σημείο τομής όλων των παραπάνω στοιχείων συμμετρίας και αντιστοιχεί στη διεργασία $\boldsymbol{i}$.

Έτσι, το σύνολο των διεργασιών της ομάδας σημείου $\boldsymbol{O_h}$ είναι:

Ομάδα σημείου $\boldsymbol{O_h}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $3\boldsymbol{C}_4$, $3\boldsymbol{C}_4^3$, $4\boldsymbol{C}_3$, $4\boldsymbol{C}_3^2$, $6\boldsymbol{C}_2'$, $3\boldsymbol{C}_2$, $\boldsymbol{i}$, $3\boldsymbol{S}_4$, $3\boldsymbol{S}_4^3$, $4\boldsymbol{S}_6$, $4\boldsymbol{S}_6^5$, $3\boldsymbol{\sigma}_h$, $6\boldsymbol{\sigma}_d$

Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{O}$ περιέχει μόνο τις κατάλληλες περιστροφές της ομάδας σημείου $\boldsymbol{O_h}$, δηλαδή

Ομάδα σημείου $\boldsymbol{O}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $3\boldsymbol{C}_4$, $3\boldsymbol{C}_4^3$, $4\boldsymbol{C}_3$, $4\boldsymbol{C}_3^2$, $6\boldsymbol{C}_2'$, $3\boldsymbol{C}_2$

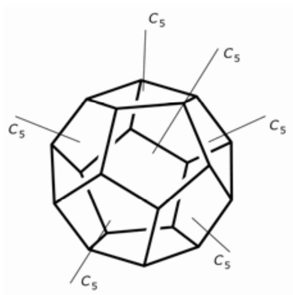


Σχήμα 4.3.4ε Μόρια που ανήκουν στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{O_h}$

Στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{O_h}$ ανήκουν μόρια όπως το κουβάνιο και αρκετά μόρια ενώσεων συναρμογής μεταβατικών στοιχείων (*Σχήμα 4.3.4.ε*), ενώ μόρια που ανήκουν στην $\boldsymbol{O}$ είναι εξαιρετικά σπάνια.

Ομάδες σημείου: $\boldsymbol{I}$, $\boldsymbol{I_h}$

Στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{I_h}$ ανήκουν τα πλατωνικά στερεά του δωδεκάεδρου και του εικοσάεδρου.



Σχήμα 4.3.4στ Στοιχεία συμμετρίας της ομάδας σημείου $\boldsymbol{I_h}$ στο δωδεκάεδρο και το εικοσάεδρο

Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{I_h}$, περιέχει εκτός της ταυτότητας τα παρακάτω στοιχεία και διεργασίες συμμετρίας:

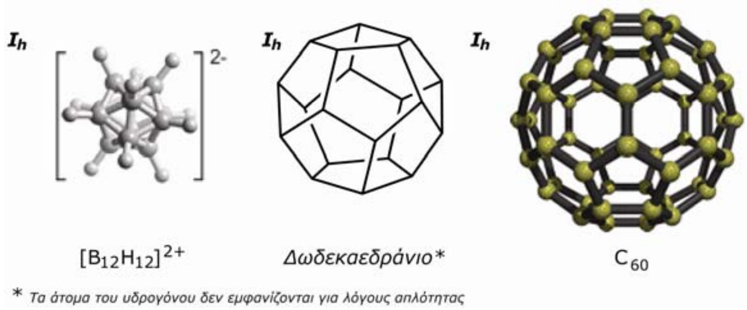
- έξι άξονες περιστροφής C_5 που διέρχονται από τα κέντρα απέναντι εδρών στο δωδεκάεδρο ή απέναντι κορυφών στο εικοσάεδρο και αντιστοιχούν στις διεργασίες $6\boldsymbol{C}_5$, $6\boldsymbol{C}_5^2$, $6\boldsymbol{C}_5^3$ και $6\boldsymbol{C}_5^4$.
- δέκα άξονες περιστροφής C_3 που διέρχονται από τα μέσα απέναντι κορυφών στο δωδεκάεδρο ή εδρών στο εικοσάεδρο και αντιστοιχούν στις διεργασίες $10\boldsymbol{C}_3$ και $10\boldsymbol{C}_3^2$.
- δεκαπέντε άξονες περιστροφής C_2 που διχοτομούν τις απέναντι ακμές τόσο στο δωδεκάεδρο όσο και στο εικοσάεδρο και αντιστοιχούν στις διεργασίες $15\boldsymbol{C}_2$.
- έξι άξονες στροφοκατοπτρισμού S_{10} που συμπίπτουν με τους C_5 και αντιστοιχούν στις διεργασίες $6\boldsymbol{S}_{10}$, $6\boldsymbol{S}_{10}^3$, $6\boldsymbol{S}_{10}^7$ και $6\boldsymbol{S}_{10}^9$.
- δέκα άξονες στροφοκατοπτρισμού S_6 που συμπίπτουν με τους C_3 και αντιστοιχούν στις διεργασίες $10\boldsymbol{S}_6$ και $10\boldsymbol{S}_6^5$.
- δεκαπέντε επίπεδα κατοπτρισμού σ που καθορίζονται από δύο άξονες, και αντιστοιχούν στις διεργασίες $15\boldsymbol{\sigma}$.
- το κέντρο συμμετρίας *i* που συμπίπτει με το κέντρο μάζας του δωδεκάεδρου και του εικοσάεδρου, αποτελεί το σημείο τομής όλων των παραπάνω στοιχείων συμμετρίας και αντιστοιχεί στη διεργασία $\boldsymbol{i}$.

Έτσι, το σύνολο των διεργασιών της ομάδας σημείου $\boldsymbol{I_h}$ είναι:

Ομάδα σημείου $\boldsymbol{I_h}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $6\boldsymbol{C}_5$, $6\boldsymbol{C}_5^2$, $6\boldsymbol{C}_5^3$, $6\boldsymbol{C}_5^4$, $10\boldsymbol{C}_3$, $10\boldsymbol{C}_3^2$, $15\boldsymbol{C}_2$, $\boldsymbol{i}$, $6\boldsymbol{S}_{10}$, $6\boldsymbol{S}_{10}^3$, $6\boldsymbol{S}_{10}^7$, $6\boldsymbol{S}_{10}^9$, $15\boldsymbol{\sigma}$.

Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{I}$ περιέχει μόνο τις κατάλληλες περιστροφές της ομάδας σημείου $\boldsymbol{I_h}$, δηλαδή:

Ομάδα σημείου $\boldsymbol{I_h}$. *Διεργασίες συμμετρίας:* $\boldsymbol{E}$, $6\boldsymbol{C}_5$, $6\boldsymbol{C}_5^2$, $6\boldsymbol{C}_5^3$, $6\boldsymbol{C}_5^4$, $10\boldsymbol{C}_3$, $10\boldsymbol{C}_3^2$, $15\boldsymbol{C}_2$



Σχήμα 4.3.4ζ Μόρια που ανήκουν στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{I_h}$

Στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{I_h}$ ανήκουν λίγα μόρια μεταξύ των οποίων το φουλερένιο C_{60} (Σχήμα 4.3.4ζ), ενώ μόρια που να ανήκουν στην $\boldsymbol{I}$ δεν υπάρχουν.

4.3.5 Σφαιρική ομάδα: K_h

Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{K_h}$ περιέχει ως γενεσιουργές διεργασίες τις κατάλληλες περιστροφές, $\boldsymbol{C_\infty^{\varphi}}$, περί άπειρους άξονες απειροστής τάξης, C_∞^{φ} και τις ακατάλληλες διεργασίες περιστροφής $\boldsymbol{S_\infty^{\varphi}}$ περί άπειρους άξονες στροφοκατοπτρισμού απειροστής τάξης, S_∞^{φ}. Παράγωγες διεργασίες είναι η ταυτότητα $\boldsymbol{E}$, οι δυνάμεις των αξόνων $\boldsymbol{C_\infty^{-\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{2\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{-2\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{3\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{-3\varphi}}$, . . . και $\boldsymbol{S_\infty^{-\varphi}}$, $\boldsymbol{S_\infty^{2\varphi}}$, $\boldsymbol{S_\infty^{-2\varphi}}$, $\boldsymbol{S_\infty^{3\varphi}}$, $\boldsymbol{S_\infty^{-3\varphi}}$, οι κατοπτρισμοί $\boldsymbol{\sigma}$ ως προς άπειρα επίπεδα σ και η αναστροφή $\boldsymbol{i}$. Οι διεργασίες συμμετρίας της ομάδας σημείου δίνονται παρακάτω.

Ομάδα	$\boldsymbol{K_h}$
Γενεσιουργές διεργασίες	$\boldsymbol{C_\infty^{\varphi}}$, $\boldsymbol{S_\infty^{\varphi}}$, $\infty\boldsymbol{\sigma}$
Παράγωγες διεργασίες	$\boldsymbol{E}$ $\boldsymbol{C_\infty^{-\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{2\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{-2\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{3\varphi}}$, $\boldsymbol{C_\infty^{-3\varphi}}$, . . . $\boldsymbol{S_\infty^{-\varphi}}$, $\boldsymbol{S_\infty^{2\varphi}}$, $\boldsymbol{S_\infty^{-2\varphi}}$, $\boldsymbol{S_\infty^{3\varphi}}$, $\boldsymbol{S_\infty^{-3\varphi}}$, . . . $\boldsymbol{i}$

Στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{K_h}$ ανήκει η σφαίρα και όλα τα άτομα. Η έννοια του άπειρου αριθμού αξόνων απειροστής τάξης έγκειται στο γεγονός ότι, οποιοσδήποτε άξονας με τυχαία κατεύθυνση στο χώρο και οποιαδήποτε τάξη αποτελεί άξονα συμμετρίας της σφαίρας, αρκεί βέβαια να διέρχεται από το κέντρο της που αποτελεί και το κέντρο αναστροφής i. Επίσης είναι προφανές ότι υπάρχουν άπειρα επίπεδα σ που διέρχονται από κέντρο αναστροφής και είναι κάθετα σε έναν από τους άξονες C_∞^{φ}.

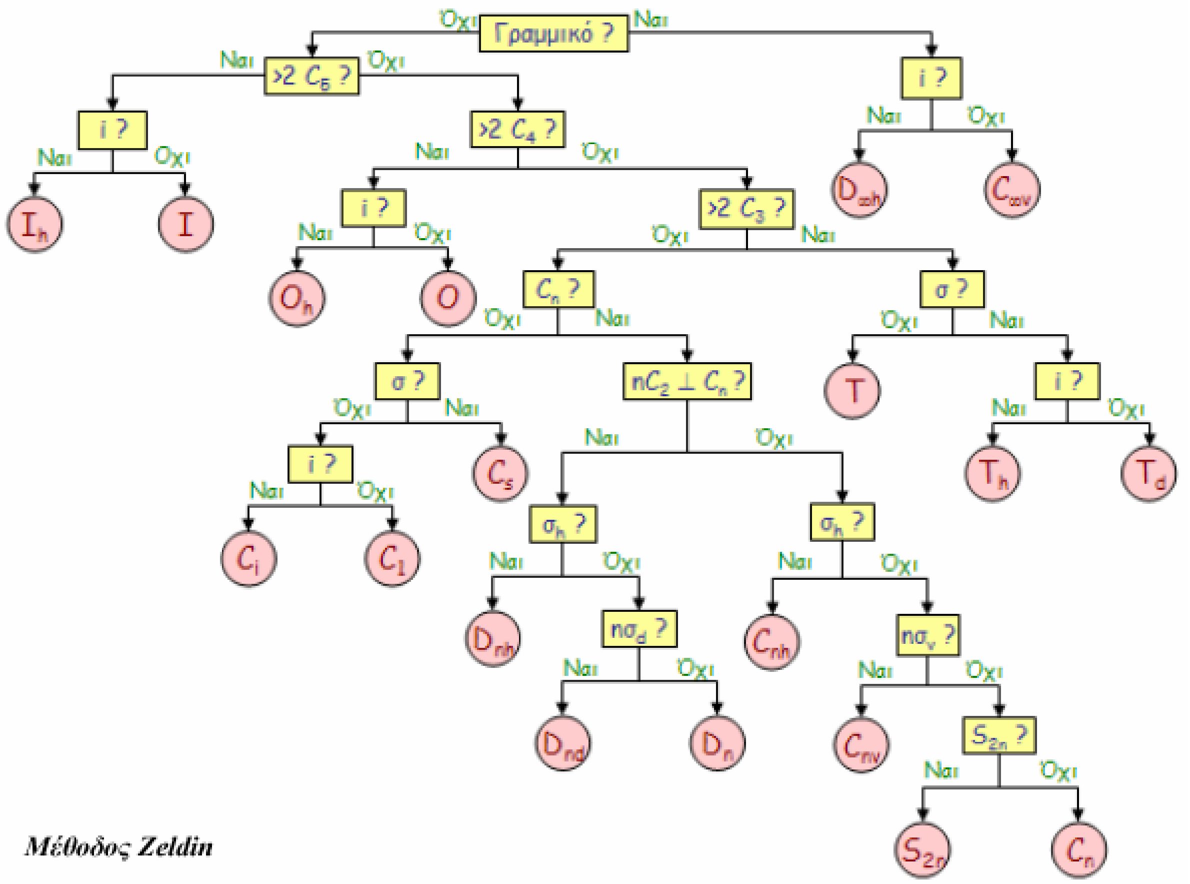
4.4 Συστηματική Μέθοδος Εύρεσης της Ομάδας Σημείου ενός Μορίου

Σε κάθε εφαρμογή της μοριακής συμμετρίας η εύρεση της ομάδας σημείου στην οποία ανήκει το υπό μελέτη μόριο είναι το πρώτο και απαραίτητο βήμα. Ο εντοπισμός όμως όλων των στοιχείων συμμετρίας του μορίου πολλές φορές είναι δύσκολος αφού υπάρχουν ομάδες σημείου που έχουν πάνω από 100 διεργασίες συμμετρίας. Παρόλα αυτά σε κάθε ομάδα σημείου υπάρχουν ένα ή περισσότερα στοιχεία συμμετρίας "κλειδιά" που είναι χαρακτηριστικά για τη συγκεκριμένη ομάδα και αντιστοιχούν στις γενεσιουργές διεργασίες από τις οποίες προκύπτουν όλες οι άλλες.

Για παράδειγμα η ύπαρξη σε ένα μόριο ενός κύριου άξονα C_3 και τριών αξόνων C_2 κάθετων σ' αυτόν σημαίνει ότι θα ανήκει σε μια από τις διεδρικές ομάδες σημείου ($\boldsymbol{D_3}$, $\boldsymbol{D_{3h}}$, $\boldsymbol{D_{3d}}$). Αν το μόριο έχει επιπλέον ένα επίπεδο κατοπτρισμού σ_h τότε ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{D_{3h}}$. Στην αντίθετη περίπτωση, αν έχει επίπεδα κατοπτρισμού σ_v ανήκει στην $\boldsymbol{D_{3d}}$, ενώ αν δεν έχει επίπεδα σ_v ανήκει στην $\boldsymbol{D_3}$.

Με βάση τις παραπάνω διαπιστώσεις και μετά από συστηματική μελέτη των στοιχείων συμμετρίας των ομάδων σημείου ο Zeldin πρότεινε μια απλή μέθοδο εύρεσης της ομάδας σημείου ενός μορίου όπου η σταδιακή αναγνώριση κάποιων χαρακτηριστικών στοιχείων συμμετρίας οδηγεί στον εντοπισμό της ομάδας σημείου του μορίου.

Σύμφωνα με τη μέθοδο Zeldin ακολουθώντας μια σειρά από λογικά βήματα αναζητούνται κάποια χαρακτηριστικά στοιχεία συμμετρίας στο υπό μελέτη μόριο και η ύπαρξη ή μη αυτών οδηγεί στην εύρεση της ομάδας σημείου του μορίου. Το λογικό διάγραμμα της μεθόδου δίνεται στο *Σχήμα 4.4*, ενώ τα ερωτήματα που τίθενται σε κάθε λογικό βήμα και οι συνέπειές τους αναλύονται παρακάτω.



Σχήμα 4.4 Λογικό διάγραμμα της μεθόδου Zeldin

Πορεία εύρεσης της ομάδας σημείου ενός μορίου σύμφωνα με τη μέθοδο Zeldin

Είναι το μόριο γραμμικό;

Αν το μόριο είναι γραμμικό αναζητείται κέντρο συμμετρίας , *i*.

Υπάρχει κέντρο συμμετρίας, i;

Αν το μόριο έχει κέντρο συμμετρίας, *i*, ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{D_{\infty h}}$, ενώ αν δεν έχει ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_{\infty v}}$.

Αν το μόριο δεν είναι γραμμικό αναζητούνται δύο ή περισσότεροι άξονες περιστροφής C_5.

Υπάρχουν δύο ή περισσότεροι άξονες περιστροφής πέμπτης τάξης, C_5*;*

Αν το μόριο έχει δύο ή περισσότερους άξονες περιστροφής C_5 και έχει επίσης κέντρο συμμετρίας, *i*, ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{I_h}$, ενώ αν δεν έχει κέντρο συμμετρίας, ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{I}$

Αν το μόριο δεν έχει δύο ή περισσότερους άξονες περιστροφής C_5 αναζητούνται δύο ή περισσότεροι άξονες C_4.

Υπάρχουν δύο ή περισσότεροι άξονες περιστροφής τέταρτης τάξης, C_4*;*

Αν το μόριο έχει δύο ή περισσότερους άξονες περιστροφής C_4 και έχει επίσης κέντρο συμμετρίας, *i*, ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{O_h}$, ενώ αν δεν έχει κέντρο συμμετρίας, ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{O}$

Αν το μόριο δεν έχει δύο ή περισσότερους άξονες περιστροφής C_4 αναζητούνται δύο ή περισσότεροι άξονες C_3.

Υπάρχουν δύο ή περισσότεροι άξονες περιστροφής τρίτης τάξης, C_3;

Αν το μόριο έχει περισσότερους από δύο άξονες περιστροφής C_3 αναζητείται επίπεδο κατοπτρισμού, *σ*.

Υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού, σ;

Αν το μόριο δεν έχει επίπεδο κατοπτρισμού, *σ*, ανήκει στην ομάδα σημείου ***T***, ενώ αν δεν έχει επίπεδο κατοπτρισμού αναζητείται κέντρο συμμετρίας, *i*.

Υπάρχει κέντρο συμμετρίας, i;

Αν το μόριο έχει κέντρο συμμετρίας, *i*, ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{T_h}$, ενώ αν δεν έχει κέντρο συμμετρίας, *i*, ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{T_d}$.

Αν το μόριο δεν έχει δύο ή περισσότερους άξονες περιστροφής C_3 αναζητείται ένας τουλάχιστον άξονας περιστροφής.

Υπάρχει ένας τουλάχιστον άξονας περιστροφής, C_n;

Αν το μόριο δεν έχει άξονες περιστροφής αναζητείται επίπεδο κατοπτρισμού, *σ*.

Υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού, σ;

Αν το μόριο έχει επίπεδο κατοπτρισμού, *σ*, ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_s}$, ενώ αν δεν έχει επίπεδο κατοπτρισμού αναζητείται κέντρο συμμετρίας, *i*.

Υπάρχει κέντρο συμμετρίας, i;

Αν το μόριο έχει κέντρο συμμετρίας, *i*, ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_i}$ ενώ αν δεν έχει κέντρο συμμετρίας, *i*, ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_1}$.

Αν το μόριο έχει έναν τουλάχιστον άξονα περιστροφής επιλέγεται ο άξονας με τη μεγαλύτερη τάξη (κύριος άξονας), C_n, και αναζητούνται *n* άξονες περιστροφής δεύτερης τάξης, C_2, κάθετοι σε αυτόν.

Υπάρχουν n άξονες περιστροφής δεύτερης τάξης, C_2, κάθετοι στον C_n;

Αν το μόριο έχει *n* άξονες περιστροφής, C_2, κάθετους στον κύριο άξονα, C_n, αναζητείται επίπεδο κατοπτρισμού σ_h.

Υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού, σ_h;

Αν υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού σ_h το μόριο ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{D_{nh}}$, ενώ αν δεν υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού αναζητείται επίπεδο κατοπτρισμού σ_d.

Υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού, σ_d;

Αν υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού σ_d το μόριο ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{D_{nd}}$, ενώ αν δεν υπάρχει ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{D_n}$.

Αν το μόριο δεν έχει *n* άξονες περιστροφής, C_2, κάθετους στον κύριο άξονα, C_n, αναζητείται επίπεδο κατοπτρισμού σ_h.

Υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού, σ_h;

Αν υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού σ_h το μόριο ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_{nh}}$, ενώ αν δεν υπάρχει επίπεδο κατοπτρισμού αναζητούνται n επίπεδα κατοπτρισμού σ_v.

Υπάρχουν n επίπεδα κατοπτρισμού σ_v;

Αν υπάρχουν n επίπεδα κατοπτρισμού σ_v το μόριο ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_{nv}}$, ενώ αν δεν υπάρχουν αναζητείται άξονας στροφοκατοπτρισμού S_{2n}.

Υπάρχει άξονας στροφοκατοπτρισμού, S_{2n};

Αν υπάρχει άξονας στροφοκατοπτρισμού S_{2n}, το μόριο ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{S_{2n}}$, ενώ αν δεν υπάρχει ανήκει στην ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_n}$.

Σύνοψη

1. Η περιγραφή της συμμετρίας ενός μορίου στα πλαίσια της μοριακής συμμετρίας συνίσταται στην εύρεση και καταγραφή του συνόλου των στοιχείων και διεργασιών συμμετρίας που απαντώνται στο μόριο. Συνήθως εντοπίζεται ένας αριθμός στοιχείων συμμετρίας και στη συνέχεια με βάση τους συνδυασμούς και τις δυνάμεις των διεργασιών που έχουν εντοπισθεί προκύπτουν οι υπόλοιπες διεργασίες και τα στοιχεία συμμετρίας.
2. Το πλήρες σύνολο των διεργασιών συμμετρίας ενός μορίου περιγράφει σαφώς τη συμμετρία ενός μορίου και καλείται *ομάδα συμμετρίας* ή *ομάδα σημείου του μορίου*.
3. Οι ομάδες σημείου ταξινομούνται σε τέσσερις κατηγορίες: τις *μη περιστροφικές*, τις *περιστροφικές μοναδικού άξονα*, τις *διεδρικές* και τις *κυβικές*.
4. Οι μη περιστροφικές ομάδες χαρακτηρίζονται από την απουσία αξόνων περιστροφής και την παρουσία επιπέδου κατοπτρισμού (ομάδα $\boldsymbol{C_s}$), κέντρου αναστροφής (ομάδα $\boldsymbol{C_i}$) ή την απουσία στοιχείων συμμετρίας (ομάδα $\boldsymbol{C_1}$).
5. Κοινό χαρακτηριστικό των περιστροφικών ομάδων σημείου μοναδικού άξονα είναι η ύπαρξη ενός μοναδικού άξονα περιστροφής C_n ή στροφοκατοπτρισμού S_{2n}. Στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_n}$ δεν υπάρχει άλλο στοιχείο συμμετρίας εκτός του C_n. Στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_{nv}}$ υπάρχουν και *n* κατακόρυφα επίπεδα κατοπτρισμού $\sigma_{v,d}$. Στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{C_{nh}}$ υπάρχει επιπλέον και επίπεδο κατοπτρισμού σ_h και συνεπώς S_n, ενώ για *n* άρτιο υπάρχει επιπλέον το κέντρο αναστροφής *i*. Στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{S_{2n}}$ δεν υπάρχει άλλο στοιχείο συμμετρίας εκτός του S_{2n}. Από τις δυνάμεις της διεργασίας $\boldsymbol{S}_{2n}$ προκύπτουν και άξονες περιστροφής μικρότερης τάξης, ενώ για $2n=6$ προκύπτει και κέντρο αναστροφής *i*. Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_{\infty h}}$, στην οποία ανήκουν τα μη κεντροσυμμετρικά γραμμικά μόρια, περιέχει άξονα περιστροφής C_∞^{φ} και άπειρα επίπεδα σ_v.
6. Κοινό χαρακτηριστικό των διεδρικών ομάδων σημείου είναι η ύπαρξη ενός κύριου άξονα περιστροφής C_n και *n* αξόνων C_2 κάθετων στον κύριο άξονα. Στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_n}$ δεν υπάρχει άλλο στοιχείο συμμετρίας εκτός του C_n και των *n* αξόνων C_2. Στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_{nd}}$ υπάρχουν επιπλέον *n* κατακόρυφα επίπεδα κατοπτρισμού σ_d, καθώς και άξονας στροφοκατοπτρισμού S_{2n}. Στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_{nh}}$ υπάρχουν επιπλέον *n* κατακόρυφα επίπεδα κατοπτρισμού $\sigma_{v,d}$ και ένα επίπεδο κατοπτρισμού σ_h και συνεπώς άξονας στροφοκατοπτρισμού S_n. Όταν το *n* είναι άρτιο υπάρχει και κέντρο αναστροφής *i*. Η ομάδα σημείου $\boldsymbol{D_{\infty h}}$, στην οποία ανήκουν τα κεντροσυμμετρικά γραμμικά μόρια, περιέχει άξονα περιστροφής C_∞^{φ}, άπειρους άξονες περιστροφής C_2 κάθετους στον κύριο άξονα C_∞^{φ}, άξονα στροφοκατοπτρισμού S_∞^{φ}, άπειρα επίπεδα κατοπτρισμού σ_v και κέντρο αναστροφής i.
7. Κοινό χαρακτηριστικό των κυβικών ομάδων σημείου είναι η ύπαρξη πολλαπλών αξόνων περιστροφής C_n υψηλής τάξης ($n>2$). Περιέχουν επίσης πλήθος άλλων στοιχείων και διεργασιών συμμετρίας. Σε αυτές τις ομάδες σημείου ανήκουν τα πέντε πλατωνικά στερεά: *τετράεδρο*, *κύβος*, *οκτάεδρο*, *δωδεκάεδρο* και *εικοσάεδρο*.
8. Η σφαιρική ομάδα σημείου $\boldsymbol{K_h}$ περιέχει ως γενεσιουργές διαδικασίες άπειρες κατάλληλες περιστροφές απειροστής τάξης, $\boldsymbol{C_\infty^{\varphi}}$, άπειρες ακατάλληλες περιστροφές απειροστής τάξης, $\boldsymbol{C_\infty^{\varphi}}$, άπειρα επίπεδα κατοπτρισμού *σ* και την αναστροφή ***i***.
9. Όλες οι ομάδες σημείου εκτός των παραπάνω γενεσιουργών διεργασιών συμμετρίας περιέχουν την ταυτότητα, καθώς και όλες τις παράγωγες διεργασίες που προκύπτουν από τις δυνάμεις και τους συνδυασμούς των γενεσιουργών διεργασιών.
10. Η εύρεση της ομάδας σημείου ενός μορίου διευκολύνεται σημαντικά από τη συστηματική μέθοδο Zeldin. Σύμφωνα με αυτήν ακολουθώντας μια σειρά από λογικά βήματα αναζητούνται κάποια χαρακτηριστικά στοιχεία συμμετρίας στο υπό μελέτη μόριο και η ύπαρξη ή μη αυτών οδηγεί στην εύρεση της ομάδας σημείου του μορίου.