

5. Θεωρία Ομάδων και Μοριακή Συμμετρία

Διδακτικοί στόχοι

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

- ορίζετε την έννοια της μαθηματικής ομάδας και να περιγράφετε τις ιδιότητες των ομάδων
- αναγνωρίζετε τις δυνατές ομάδες με τάξη μέχρι δέκα
- αναγνωρίζετε τις ομάδες σημείου ως μαθηματικές ομάδες
- αναγνωρίζετε τις περιόδους των στοιχείων των μαθηματικών ομάδων και των διεργασιών των ομάδων σημείου
- εντοπίζετε την μαθηματική ομάδα που είναι ισόμορφη με μια ομάδα σημείου
- καταστρώνετε τον πίνακα πολλαπλασιασμού μαθηματικών ομάδων και ομάδων σημείου
- αναγνωρίζετε τις αβελιανές και τις κυκλικές μαθηματικές ομάδες και ομάδες σημείου
- αναγνωρίζετε τις δυνατές υποομάδες μιας μαθηματικής ομάδας ή ομάδας σημείου
- εκτελείτε μετασχηματισμούς ομοιότητας μεταξύ στοιχείων μιας μαθηματικής ομάδας ή διεργασιών μιας ομάδας σημείου
- ομαδοποιείτε σε κλάσεις τα στοιχεία μιας μαθηματικής ομάδας ή τις διεργασίες μιας ομάδας σημείου

Προαπαιτούμενες γνώσεις

Απλές μαθηματικές έννοιες. Κατανόηση των διεργασιών συμμετρίας περιστροφής, στροφοκατοπτρισμού, κατοπτρισμού και αναστροφής και ευχέρεια στην εύρεση των διεργασιών που προκύπτουν από τους συνδυασμούς και τις δυνάμεις των παραπάνω διεργασιών. Γνώση των διεργασιών συμμετρίας που περιέχει κάθε ομάδα σημείου.

5.1 Μαθηματικές Ομάδες και Ομάδες Σημείου

5.1.1 Ορισμός Μαθηματικής Ομάδας

Ως μαθηματική ομάδα, \mathbf{G} , ορίζεται ένα σύνολο από αντικείμενα ή στοιχεία (A, B, C, \dots) μαζί με έναν κανόνα ή πράξη συνδυασμού (\cdot) με βάση τον οποίον τα στοιχεία αλληλοσυσχετίζονται ($A \cdot B$). Ο συνδυασμός δύο στοιχείων καλείται γενικά και πολλαπλασιασμός και το αποτέλεσμα του συνδυασμού δύο στοιχείων γινόμενο, χωρίς αυτοί οι όροι να αναφέρονται απαραίτητα στην αλγεβρική πράξη του πολλαπλασιασμού. Τα στοιχεία μιας ομάδας και ο κανόνας συνδυασμού τους πρέπει να ικανοποιούν τις παρακάτω ιδιότητες:

1. *Κλειστότητα.* Το αποτέλεσμα του πολλαπλασιασμού (συνδυασμού) οποιωνδήποτε δύο στοιχείων της ομάδας (το γινόμενο δύο στοιχείων $A \cdot B$ ή απλώς AB) είναι επίσης ένα στοιχείο της ομάδας, δηλαδή:

$$A \cdot B = C \in \mathbf{G}, \forall A, B \in \mathbf{G}.$$

Στη θεωρία των ομάδων δεν ισχύει πάντα η αντιμεταθετική ιδιότητα ($A \cdot B = B \cdot A$) και η σειρά εμφάνισης των στοιχείων στο γινόμενο έχει ιδιαίτερη σημασία. Έτσι, το γινόμενο $A \cdot B$ εκφράζεται ως το B πολλαπλασιασμένο από αριστερά με το A , ενώ το $B \cdot A$ ως το B πολλαπλασιασμένο από δεξιά με το A .

2. *Υπαρξη μοναδιαίου στοιχείου.* Υπάρχει ένα μοναδιαίο στοιχείο ή ταυτότητα που συμβολίζεται ως E , το οποίο αντιμετατίθεται με κάθε στοιχείο της ομάδας και το γινόμενό του με οποιοδήποτε στοιχείο ισούται με το ίδιο το στοιχείο, δηλαδή:

$$E \cdot A = A \cdot E = A, \forall A \in \mathbf{G}.$$

3. *Ισχύς επιμεριστικής ιδιότητας.* Ο κανόνας συνδυασμού (ο πολλαπλασιασμός) έχει την επιμεριστική ιδιότητα, δηλαδή:

$$A \cdot (B \cdot C) = (A \cdot B) \cdot C, \forall A, B, C \in \mathbf{G}.$$

Είναι προφανές ότι η επιμεριστική ιδιότητα ισχύει και για επαναλαμβανόμενα γινόμενα, δηλαδή:

$$(A \cdot B)(C \cdot D)(F \cdot G) = A \cdot (B \cdot C) \cdot (D \cdot F) \cdot G = \dots$$

4. *Υπαρξη αντιστρόφων των στοιχείων.* Για κάθε στοιχείο της ομάδας, A , υπάρχει ένα *αντίστροφο* στοιχείο, A^{-1} , τέτοιο ώστε $A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = E$, το οποίο αποτελεί επίσης στοιχείο της ομάδας. Το αντίστροφο ενός στοιχείου ορίζεται πάντα με βάση τον κανόνα συνδυασμού και το στοιχείο της ταυτότητας της ομάδας. Έτσι, αν ο κανόνας συνδυασμού είναι η αλγεβρική πρόσθεση, με στοιχείο ταυτότητας το 0, ισχύει $A^{-1} \equiv -A$, ενώ αν ο κανόνας συνδυασμού είναι ο αλγεβρικός πολλαπλασιασμός, με στοιχείο ταυτότητας το 1, ισχύει $A^{-1} \equiv 1/A$. Σχετικά με τα αντίστροφα στοιχεία αποδεικνύεται εύκολα το θεώρημα σύμφωνα με το οποίο *το αντίστροφο του γινομένου ενός ή περισσότερων στοιχείων ισούται με το γινόμενο των αντίστροφων στοιχείων με αντίθετη σειρά*, δηλαδή:

$$(A \cdot B \cdot \dots \cdot C \cdot D)^{-1} = D^{-1} \cdot C^{-1} \cdot \dots \cdot B^{-1} \cdot A^{-1}$$

Όλες οι παραπάνω ιδιότητες αποτελούν την *αναγκαία και ικανή συνθήκη* για να αποτελεί ένα σύνολο στοιχείων και ο κανόνας συνδυασμού τους μαθηματική ομάδα. Για παράδειγμα, τα στοιχεία $\{1, -1, i, -i\}$ με βάση την πράξη του αλγεβρικού πολλαπλασιασμού συνιστούν μια μαθηματική ομάδα, ενώ τα στοιχεία $\{i, -i\}$ όχι.

Μια ομάδα μπορεί να έχει πεπερασμένο ή άπειρο αριθμό στοιχείων. Το πεπερασμένο πλήθος των στοιχείων μιας ομάδας συμβολίζεται ως h και καλείται *τάξη της ομάδας*. Στον Πίνακα 5.1.1α δίνονται μερικά παραδείγματα απλών μαθηματικών ομάδων.

Πίνακας 5.1.1α. Μερικά παραδείγματα απλών μαθηματικών ομάδων

Στοιχεία ομάδας	Κανόνας συνδυασμού	Στοιχείο ταυτότητας	Τάξη
{Όλοι οι πραγματικοί αριθμοί}	Πρόσθεση	0	∞
{Όλοι οι μιγαδικοί αριθμοί}	Πρόσθεση	0	∞
{Όλοι οι πραγματικοί αριθμοί εκτός του 0}	Πολλαπλασιασμός	1	∞
{Όλοι οι μιγαδικοί αριθμοί εκτός του $0+0i$ }	Πολλαπλασιασμός	$1+i$	∞
{Όλοι οι ακέραιοι αριθμοί}	Πρόσθεση	0	∞
{Όλοι οι άρτιοι ακέραιοι αριθμοί}	Πρόσθεση	0	∞
{1, -1}	Πολλαπλασιασμός	1	2
{1, a, a ² }, με a ³ =1	Πολλαπλασιασμός	1	3
{1, -1, i, -i}	Πολλαπλασιασμός	1	4
{1, a, a ² , a ³ }, με a ⁴ =1	Πολλαπλασιασμός	1	4
{1, a, b, ab}, με a ² =1, b ² =1 και ab=ba	Πολλαπλασιασμός	1	4

Αν για ένα στοιχείο A μιας ομάδας με τάξη h υπάρχει ένας τουλάχιστον θετικός ακέραιος αριθμός n για τον οποίο ισχύει $A^n = E$, το στοιχείο αυτό θεωρείται ότι έχει *πεπερασμένη τάξη* ή *περίοδο*. Ο ελάχιστος τέτοιος ακέραιος αριθμός καλείται *τάξη* ή *περίοδος του στοιχείου*, συμβολίζεται ως $o(A)$ και είναι πάντα ακέραιος διαιρέτης της τάξης της ομάδας, δηλαδή $h/o(A) = 1, 2, \dots, h$. Σε αντίθετη περίπτωση το στοιχείο έχει *άπειρη περίοδο*. Είναι προφανές $o(E) = 1$, εφόσον $E^1 = E$, και ότι σε μια ομάδα με τάξη h για κάθε στοιχείο της ισχύει $1 \leq o(A) \leq h$. Στη συνέχεια θα χρησιμοποιηθεί ο όρος «περίοδος» για να μην υπάρξει σύγχυση με τον όρο «τάξη» της ομάδας.

Αποδεικνύεται, ότι για κάθε τάξη, h , υπάρχει πεπερασμένο πλήθος δυνατών ομάδων, οι οποίες καλούνται *αφηρημένες ομάδες* και διαφέρουν ως προς τις περιόδους των στοιχείων τους. Οι ομάδες αυτές προκύπτουν από κάποιες *γεννήτριες* (a, b, ab, ...) με βάση μια σειρά από συμβάσεις μεταξύ αυτών. Ο συμβολισμός των ομάδων αυτών καθώς και η περιγραφή και οι περίοδοι των στοιχείων τους για τιμές $h \leq 10$ δίνονται στον Πίνακα 5.1.1β. Από τον πίνακα αυτόν προκύπτει σαφώς ότι οι δυνατές αφηρημένες ομάδες για κάθε τάξη h διαφοροποιούνται ως προς τις γεννήτριες αλλά και το πλήθος των στοιχείων σε κάθε περίοδο. Ανάλογες αφηρημένες ομάδες υπάρχουν και για $h > 10$.

Αποδεικνύεται ότι οποιαδήποτε πεπερασμένη ομάδα με τάξη h είναι *ισόμορφη* με μια από τις αφηρημένες ομάδες με την ίδια τάξη h , δηλαδή έχει στοιχεία με περιόδους ίδιες με αυτές των στοιχείων της αφηρημένης ομάδας και

υιοθετεί όλες τις ιδιότητες της αφηρημένης ομάδας. Μεταξύ των στοιχείων δύο ισόμορφων ομάδων υπάρχει μια αντιστοιχία ένα προς ένα.

με την ομάδα Z_4 του Πίνακα 5.1.1β με αντιστοιχία στοιχείων $E=a^3, A=a^1, B=a^2$ και $C=a^2$.

Πίνακας 5.1.1β. Αφηρημένες ομάδες με $h \leq 10$

Τάξη Ομάδα	$E A B C D F G H I J$	Συμβάσεις	Περίοδοι στοιχείων
1 Z_1	1		1: E
2 Z_2	1 a	$a^2=1$	1: E, 2: A
3 Z_3	1 a a ²	$a^3=1$	1: E, 3: A, B
4 Z_4	1 a a ² a ³	$a^4=1$	1: E, 2: B, 4: A, C
$Z_2 \times Z_2$	1 a b ab	$a^2=1, b^2=1, ba=ab$	1: E, 2: A, B, C
5 Z_5	1 a a ² a ³ a ⁴	$a^5=1$	1: E, 5: A, B, C, D
6 Z_6	1 a a ² a ³ a ⁴ a ⁵	$a^6=1$	1: E, 2: C, 3: B, D, 6: A, F
S_3	1 a a ² b aba ² b	$a^3=1, b^2=1, ba=a^{-1}b$	1: E, 2: C, D, F, 3: A, B
7 Z_7	1 a a ² a ³ a ⁴ a ⁵ a ⁶	$a^7=1$	1: E, 7: A, B, C, D, F, G
8 Z_8	1 a a ² a ³ a ⁴ a ⁵ a ⁶ a ⁷	$a^8=1$	1: E, 2: D, 4: B, G, 8: A, C, F, H
$Z_4 \times Z_2$	1 a a ² a ³ b ab a ² b a ³ b	$a^4=1, b^2=1, ba=ab$	1: E, 2: B, D, G, 4: A, C, F, H
$Z_2 \times Z_2 \times Z_2$	1 a b ab c ac bc abc	$a^2=1, b^2=1, c^2=1, ba=ab, ca=ac, cb=bc$	1: E, 2: A, B, C, D, F, G, H
D_4	1 a a ² a ³ b ab a ² b a ³ b	$a^4=1, b^2=1, ba=a^{-1}b$	1: E, 2: B, D, F, G, H, 4: A, C
Q	1 a a ² a ³ b ab a ² b a ³ b	$a^4=1, b^2=a^2, ba=a^{-1}b$	1: E, 2: B, 4: A, C, D, F, G, H
9 Z_9	1 a a ² a ³ a ⁴ a ⁵ a ⁶ a ⁷ a ⁸	$a^9=1$	1: E, 3: A, B, D, F, H, I, 9: C, G
$Z_3 \times Z_3$	1 a a ² b aba ² b b ² ab ² a ² b ²	$a^3=1, b^3=1, ba=ab$	1: E, 3: A, B, C, D, F, G, H, I
10 Z_{10}	1 a a ² a ³ a ⁴ a ⁵ a ⁶ a ⁷ a ⁸ a ⁹	$a^{10}=1$	1: E, 2: F, 5: B, D, G, I, 10: A, C, F, H, J
D_5	1 a a ² a ³ a ⁴ b ab a ² b a ³ b a ⁴ b	$a^5=1, b^2=1, ba=a^{-1}b$	1: E 2: F, G, H, I, J 5: A, B, C, D

Ένα παράδειγμα μαθηματικής ομάδας τρίτης τάξης με πράξη τον αλγεβρικό πολλαπλασιασμό είναι αυτή που προκύπτει από τις δυνάμεις a^1, a^2 και a^3 της γεννήτριας $a=e^{(2\pi/3)i}$. Με βάση τον τύπο του Euler [$e^{i\theta}=\cos(\theta)+i\sin(\theta)$] προκύπτει ότι ...

$$a^3=\cos(2\pi)+i\sin(2\pi)=1+0=1$$

$$a^1=\cos(2\pi/3)+i\sin(2\pi/3)=-1/2+(\sqrt{3}/2)i$$

$$a^2=\cos(4\pi/3)+i\sin(4\pi/3)=-1/2-(\sqrt{3}/2)i$$

Τα στοιχεία αυτής της ομάδας αποτελούν τις λύσεις της πολυωνυμικής εξίσωσης $x^3=1$ και αυτό μας παραπέμπει στις πρώτες ιδέες του Galois, ο οποίος εισήγαγε τις αρχές της θεωρίας των ομάδων μελετώντας τις πολυωνυμικές εξισώσεις. Είναι εύκολο να διαπιστώσει κανείς ότι το στοιχείο της ταυτότητας της ομάδας είναι το a^3 , καθόσον $a^3=1$ και ότι για τα τρία αυτά στοιχεία ισχύει ...

$$a^1 a^1 = a^2, a^1 a^2 = a^2 a^1 = a^3, a^1 a^3 = a^3 a^1 = a^1, a^2 a^2 = a^1, a^2 a^3 = a^3 a^2 = a^2, a^3 a^3 = a^3$$

$$(a^1)^{-1} = a^2, (a^2)^{-1} = a^1, (a^3)^{-1} = a^3$$

Οι περίοδοι των τριών στοιχείων είναι $o(a^3)=1, o(a^1)=3$ και $o(a^2)=3$. Συνεπώς η ομάδα αυτή είναι ισόμορφη με την ομάδα Z_3 του Πίνακα 5.1.1β με αντιστοιχία στοιχείων $E=a^3, A=a^1$ και $B=a^2$.

Ένα παράδειγμα μαθηματικής ομάδας τέταρτης τάξης με πράξη τον αλγεβρικό πολλαπλασιασμό είναι αυτή που προκύπτει από τις δυνάμεις a^1, a^2, a^3 και a^4 της γεννήτριας $a=e^{(\pi/2)i}$ για τα οποία προκύπτει ότι ...

$$a^4=\cos(2\pi)+i\sin(2\pi)=1+0=1$$

$$a^1=\cos(\pi/2)+i\sin(\pi/2)=0+i=i$$

$$a^2=\cos(\pi)+i\sin(\pi)=-1+0=-1$$

$$a^3 = \sin(3\pi/2) + i\eta\mu(3\pi/2) = 0 - i = -i$$

Τα στοιχεία αυτής της ομάδας αποτελούν τις λύσεις της πολυωνυμικής εξίσωσης $x^4=1$. Εύκολα μπορεί να διαπιστώσει κανείς ότι το στοιχείο της ταυτότητας της ομάδας είναι το a^4 , καθόσον $a^4=1$ και ότι για τα τέσσερα αυτά στοιχεία ισχύει ...

$$a^1 a^1 = a^2, a^1 a^2 = a^2 a^1 = a^3, a^1 a^3 = a^3 a^1 = a^4, a^1 a^4 = a^4 a^1 = a^1, a^2 a^2 = a^4, a^2 a^3 = a^3 a^2 = a^1, a^2 a^4 = a^4 a^2 = a^2, a^3 a^3 = a^2, a^3 a^4 = a^4 a^3 = a^3$$

$$(a^1)^{-1} = a^3, (a^2)^{-1} = a^2, (a^3)^{-1} = a^1, (a^4)^{-1} = a^4$$

Οι περίοδοι των τριών στοιχείων είναι $o(a^4)=1, o(a^1)=4, o(a^2)=2$ και $o(a^3)=4$. Συνεπώς η ομάδα αυτή είναι ισόμορφη

5.1.2 Ομάδες Σημείου στη Μοριακή Συμμετρία

Στη μοριακή συμμετρία οι ομάδες σημείου, G , περιέχουν ως στοιχεία απλές διεργασίες συμμετρίας ή τις δυνάμεις τους. Οι ομάδες αυτές αποτελούν μαθηματικές ομάδες με κανόνα ή πράξη το συνδυασμό των διεργασιών συμμετρίας και υπακούν σε όλες τις ιδιότητες των μαθηματικών ομάδων, δηλαδή:

1. *Κλειστότητα.* Όπως είδαμε στην παράγραφο 3.10 πράγματι το αποτέλεσμα του συνδυασμού οποιωνδήποτε δύο διεργασιών της ομάδας σημείου (XY) είναι επίσης ένα στοιχείο της ομάδας, δηλαδή:

$$XY = Z \in G, \forall X, Y \in G.$$

Κατά το συνδυασμό των διεργασιών συμμετρίας δεν ισχύει πάντα η αντιμεταθετική ιδιότητα ($XY = YX$) και η σειρά εμφάνισης των στοιχείων στο συνδυασμό έχει ιδιαίτερη σημασία.

2. *Υπαρξη μοναδιαίας διεργασίας.* Σε κάθε ομάδα σημείου υπάρχει η διεργασία της ταυτότητας, E , η οποία αντιμετατίθεται με κάθε διεργασία της ομάδας και ο συνδυασμός της με οποιαδήποτε διεργασία ισούται με την ίδια τη διεργασία, δηλαδή:

$$EX = XE = X, \forall X \in G$$

3. *Ισχύς επιμεριστικής ιδιότητας.* Ο συνδυασμός των διεργασιών προφανώς έχει την επιμεριστική ιδιότητα, δηλαδή:

$$X(YZ) = (XY)Z, \forall X, Y, Z \in G$$

4. *Υπαρξη αντιστρόφων των διεργασιών.* Όπως είδαμε στην παράγραφο 3.13 πράγματι για κάθε διεργασία της ομάδας, X , υπάρχει μια αντίστροφη διεργασία, X^{-1} , τέτοιο ώστε $XX^{-1} = X^{-1}X = E$, η οποία αποτελεί επίσης διεργασία της ομάδας.

Σύμφωνα με τα παραπάνω δικαιολογείται πλήρως η χρήση του όρου ομάδες σημείου. Οι ομάδες σημείου έχουν όλες τις ιδιότητες των μαθηματικών ομάδων και αυτό μας δίνει τη δυνατότητα της εφαρμογής όλων των εργαλείων της μαθηματικής θεωρίας των ομάδων για τη μελέτη των ομάδων σημείου και κατ' επέκταση για την εφαρμογή της μοριακής συμμετρίας στη μελέτη των ιδιοτήτων της μοριακής δομής.

Πίνακας 5.1.2α. Περίοδοι των διεργασιών συμμετρίας

Διεργασία	Περίοδος p
E	1
C_n	n
C_n^m	n
σ	2
i	2
S_n , για n άρτιο	n
S_n , για n περιττό	$2n$
S_n^m , για n άρτιο	n
S_n^m , για n περιττό	$2n$

Στο σημείο αυτό κρίνεται απαραίτητο να ορισθεί η τάξη ή περίοδος όλων των διεργασιών συμμετρίας που απαντώνται ως στοιχεία των ομάδων σημείου. Ανάλογα με τον ορισμό της περιόδου των στοιχείων μιας μαθηματικής ομάδας η τάξη ή περίοδος μιας διεργασίας συμμετρίας, $o(X)$, ορίζεται ως ο ελάχιστος θετικός ακέραιος αριθμός p για τον οποίο ισχύει ($X^p = E$), δηλαδή το ελάχιστο πλήθος των διεργασιών X που πρέπει να εφαρμοσθούν διαδοχικά σε ένα μόριο ή αντικείμενο ώστε όλα τα μέρη του να επανέλθουν στις αρχικές τους θέσεις. Η ιδιότητα αυτή θα αναφέρεται στη συνέχεια απλά ως περίοδος των διεργασιών συμμετρίας για να μην υπάρξει σύγχυση με την τάξη της ομάδας σημείου ή την τάξη των αξόνων κατάλληλης και ακατάλληλης περιστροφής.

Είναι προφανές ότι η περίοδος $o(C_n)$ των διεργασιών κατάλληλης περιστροφής C_n και των δυνάμεών τους, C_n^m , ισούται με n , εφόσον $C_n^n = E$

και $(C_n^m)^n = (C_n^n)^m = E^m = E$. Η περίοδος του κατοπτρισμού, σ , και της αναστροφής, i , είναι ίση με 2, εφόσον $\sigma^2 = E$ και $i^2 = E$ αντιστοιχώς. Η περίοδος του στροφοκατοπτρισμού, S_n , ισούται με n , μόνον όταν το n είναι άρτιο, αφού η διεργασία S_n^n αντιστοιχεί σε συνολική περιστροφή κατά $n(2\pi/n) = 2\pi$ ακτίνια και σε άρτιο αριθμό κατοπτρισμών που επαναφέρουν κάθε σημείο στην αρχική του θέση, δηλαδή $S_n^n = E$. Όταν όμως το n είναι περιττό η διεργασία S_n^n συνίσταται επίσης σε συνολική περιστροφή κατά $n(2\pi/n) = 2\pi$ ακτίνια, αλλά σε περιττό αριθμό κατοπτρισμών που δεν επαναφέρουν κάθε σημείο στην αρχική του θέση, δηλαδή $S_n^n = \sigma \neq E$. Σε αυτήν την περίπτωση η περίοδος της διεργασίας S_n^n είναι ίση με $2n$, αφού η διεργασία S_n^{2n} συνίσταται σε συνολική περιστροφή κατά $2n(2\pi/n) = 4\pi$ ακτίνια αλλά και άρτιο αριθμό κατοπτρισμών ($2n$) που επαναφέρουν κάθε σημείο στην αρχική του θέση, δηλαδή $S_n^{2n} = E$. Με την ίδια λογική προκύπτει ότι η περίοδος των δυνάμεων της διεργασίας του στροφοκατοπτρισμού, S_n^m , είναι ίση με n όταν το n είναι άρτιο και με $2n$ όταν το n είναι περιττό. Τέλος, η περίοδος της ταυτότητας είναι ίση με 1 αφού $E^1 = E$. Οι περίοδοι των διαφόρων διεργασιών συμμετρίας δίνονται στον Πίνακα 5.1.2α.

5.2 Πίνακες Πολλαπλασιασμού Ομάδων

5.2.1 Πίνακας Πολλαπλασιασμού Μαθηματικών Ομάδων

Με βάση τον ορισμό της μαθηματικής ομάδας το αποτέλεσμα του συνδυασμού οποιωνδήποτε δύο στοιχείων της ομάδας είναι επίσης ένα αντικείμενο της ομάδας, δηλαδή $AB = C$. Σε μια ομάδα με πεπερασμένη τάξη, h , το πλήθος των συνδυασμών των στοιχείων της είναι h^2 , και η γνώση του στοιχείου C που προκύπτει από κάθε συνδυασμό AB είναι απαραίτητη για την πλήρη περιγραφή της ομάδας.

	<i>E</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	...
<i>E</i>					
<i>A</i>				<i>Y</i>	
<i>B</i>			<i>X</i>		
<i>C</i>					
...					

Ο πίνακας όπου καταγράφεται το αποτέλεσμα όλων των δυνατών συνδυασμών των στοιχείων της ομάδας καλείται *πίνακας πολλαπλασιασμού* της ομάδας και είναι μοναδικός για κάθε δυνατή ομάδα με τάξη h . Αποτελείται από h στήλες και h σειρές και έχει τη μορφή που φαίνεται αριστερά.

Στον πίνακα πολλαπλασιασμού υπάρχουν οι επικεφαλίδες των στηλών και σειρών στις οποίες παρατίθενται όλα τα στοιχεία της ομάδας με πρώτη την ταυτότητα, E .

Κάθε στοιχείο του κυρίως πίνακα ($h \times h$) είναι το αποτέλεσμα του συνδυασμού των στοιχείων που αντιστοιχούν στην αντίστοιχη σειρά και στήλη. Επειδή όμως δεν ισχύει πάντα η αντιμεταθετική ιδιότητα, η σειρά του συνδυασμού (γινόμενου) ορίζεται ως (στοιχείο στήλης)·(στοιχείο σειράς). Έτσι, το στοιχείο X στον παραπάνω πίνακα είναι το γινόμενο του στοιχείου στήλης, A , πολλαπλασιασμένο από δεξιά με το στοιχείο σειράς, B , δηλαδή $X = AB$, ενώ το στοιχείο Y είναι το γινόμενο του στοιχείου στήλης, B , πολλαπλασιασμένο από δεξιά με το στοιχείο σειράς, A , δηλαδή $Y = BA$. Ο πίνακας πολλαπλασιασμού αποτελεί χαρακτηριστικό κάθε ομάδας και είναι ένα χρησιμότερο εργαλείο στη θεωρία των ομάδων.

Στον πίνακα πολλαπλασιασμού κάθε ομάδας ισχύει το παρακάτω *θεώρημα της ανακατάταξης*.

Σε κάθε σειρά και στήλη του πίνακα πολλαπλασιασμού μιας ομάδας κάθε στοιχείο εμφανίζεται μία και μόνο φορά.

Από το θεώρημα αυτό προκύπτει ότι:

1. στον πίνακα πολλαπλασιασμού δεν υπάρχουν δύο σειρές ή δύο στήλες όμοιες, δηλαδή δύο σειρές ή δύο στήλες που περιέχουν τα στοιχεία της ομάδας με την ίδια ακριβώς σειρά κατάταξης, και
2. κάθε σειρά ή στήλη του πίνακα πολλαπλασιασμού περιέχει όλα τα στοιχεία της ομάδας με διαφορετική σειρά κατάταξης.

Στους πίνακες πολλαπλασιασμού, επειδή για κάθε στοιχείο X ισχύει $EX = XE = X$, κάθε στοιχείο της πρώτης σειράς και της πρώτης στήλης αποτελεί το αντίστοιχο στοιχείο της επικεφαλίδας των στηλών ή σειρών αντιστοιχώς. Έτσι, όπως φαίνεται παρακάτω (Πίνακας α), η πρώτη σειρά και η πρώτη στήλη περιέχουν τα στοιχεία της ομάδας με την αρχική σειρά κατάταξης. Τέλος, το στοιχείο της ταυτότητας, E , βρίσκεται είτε κατά μήκος της διαγωνίου του πίνακα πολλαπλασιασμού (Πίνακας β) ή συμμετρικά ως προς τη διαγώνιο (Πίνακας γ).

Θεωρία ομάδων και μοριακή συμμετρία

	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>...</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	...
<u>A</u>	A				
<u>B</u>	B				
<u>C</u>	C				
<u>...</u>	...				

Πίνακας α

	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>...</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	...
<u>A</u>	A	E			
<u>B</u>	B		E		
<u>C</u>	C			E	
<u>...</u>	...				E

Πίνακας β

	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>...</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	...
<u>A</u>	A		E		
<u>B</u>	B	E			
<u>C</u>	C			E	
<u>...</u>	...				E

Πίνακας γ

Ο πίνακες πολλαπλασιασμού για τις αφηρημένες ομάδες με τάξη $h \leq 10$ παρατίθενται στον Πίνακα 5.2.1α. Κάτω από κάθε πίνακα δίνονται οι περιοδοί των στοιχείων της συγκεκριμένης ομάδας.

Πίνακας 5.2.1α. Πίνακες πολλαπλασιασμού αφηρημένων ομάδων με $h \leq 10$

<u>Z₁</u>	<u>E</u>
<u>E</u>	E

<u>Z₂</u>	<u>E</u>	<u>A</u>
<u>E</u>	E	A
<u>A</u>	A	E

<u>Z₃</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>
<u>E</u>	E	A	B
<u>A</u>	A	B	E
<u>B</u>	B	E	A

<u>Z₄</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>
<u>E</u>	E	A	B	C
<u>A</u>	A	B	C	E
<u>B</u>	B	C	E	A
<u>C</u>	C	E	A	B

<u>Z₂ × Z₂</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>
<u>E</u>	E	A	B	C
<u>A</u>	A	E	C	B
<u>B</u>	B	C	E	A
<u>C</u>	C	B	A	E

<u>Z₅</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	D
<u>A</u>	A	B	C	D	E
<u>B</u>	B	C	D	E	A
<u>C</u>	C	D	E	A	B
<u>D</u>	D	E	A	B	C

<u>Z₆</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>F</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	D	F
<u>A</u>	A	B	C	D	F	E
<u>B</u>	B	C	D	F	E	A
<u>C</u>	C	D	F	E	A	B
<u>D</u>	D	F	E	A	B	C
<u>F</u>	F	E	A	B	C	D

<u>S₃</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>F</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	D	F
<u>A</u>	A	B	E	D	F	C
<u>B</u>	B	E	A	F	C	D
<u>C</u>	C	F	D	E	B	A
<u>D</u>	D	C	F	A	E	B
<u>F</u>	F	D	C	B	A	E

<u>Z₇</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>F</u>	<u>G</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	D	F	G
<u>A</u>	A	B	C	D	F	G	E
<u>B</u>	B	C	D	F	G	E	A
<u>C</u>	C	D	F	G	E	A	B
<u>D</u>	D	F	G	E	A	B	C
<u>F</u>	F	G	E	A	B	C	D
<u>G</u>	G	E	A	B	C	D	F

<u>Z₈</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>F</u>	<u>G</u>	<u>H</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	D	F	G	H
<u>A</u>	A	B	C	D	F	G	H	E
<u>B</u>	B	C	D	F	G	H	E	A
<u>C</u>	C	D	F	G	H	E	A	B
<u>D</u>	D	F	G	H	E	A	B	C
<u>F</u>	F	G	H	E	A	B	C	D
<u>G</u>	G	H	E	A	B	C	D	F
<u>H</u>	H	E	A	B	C	D	F	G

<u>Z₄ × Z₂</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>F</u>	<u>G</u>	<u>H</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	D	F	G	H
<u>A</u>	A	B	C	E	F	G	H	D
<u>B</u>	B	C	E	A	G	H	D	F
<u>C</u>	C	E	A	B	H	D	F	G
<u>D</u>	D	F	G	H	E	A	B	C
<u>F</u>	F	G	H	D	A	B	C	E
<u>G</u>	G	H	D	F	B	C	E	A
<u>H</u>	H	D	F	G	C	E	A	B

<u>Z₂ × Z₂ × Z₂</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>F</u>	<u>G</u>	<u>H</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	D	F	G	H
<u>A</u>	A	E	C	B	F	D	H	G
<u>B</u>	B	C	E	A	G	H	D	F
<u>C</u>	C	B	A	E	H	G	F	D
<u>D</u>	D	F	G	H	E	A	B	C
<u>F</u>	F	D	H	G	A	E	C	B
<u>G</u>	G	H	D	F	B	C	E	A
<u>H</u>	H	G	F	D	C	B	A	E

<u>D₄</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>F</u>	<u>G</u>	<u>H</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	D	F	G	H
<u>A</u>	A	B	C	E	F	G	H	D
<u>B</u>	B	C	E	A	G	H	D	F
<u>C</u>	C	E	A	B	H	D	F	G
<u>D</u>	D	H	G	F	E	C	B	A
<u>F</u>	F	D	H	G	A	E	C	B
<u>G</u>	G	F	D	H	B	A	E	C
<u>H</u>	H	G	F	D	C	B	A	E

<u>Q</u>	<u>E</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>F</u>	<u>G</u>	<u>H</u>
<u>E</u>	E	A	B	C	D	F	G	H
<u>A</u>	A	B	C	E	F	G	H	D
<u>B</u>	B	C	E	A	G	H	D	F
<u>C</u>	C	E	A	B	H	D	F	G
<u>D</u>	D	H	G	F	B	A	E	C
<u>F</u>	F	D	H	G	C	B	A	E
<u>G</u>	G	F	D	H	E	C	B	A
<u>H</u>	H	G	F	D	A	E	C	B

Θεωρία ομάδων και μοριακή συμμετρία

Z_9	E	A	B	C	D	F	G	H	I
E	E	A	B	C	D	F	G	H	I
A	A	B	C	D	F	G	H	I	E
B	B	C	D	F	G	H	I	E	A
C	C	D	F	G	H	I	E	A	B
D	D	F	G	H	I	E	A	B	C
F	F	G	H	I	E	A	B	C	D
G	G	H	I	E	A	B	C	D	F
H	H	I	E	A	B	C	D	F	G
I	I	E	A	B	C	D	F	G	H

$Z_3 \times Z_3$	E	A	B	C	D	F	G	H	I
E	E	A	B	C	D	F	G	H	I
A	A	B	E	D	F	C	H	I	G
B	B	E	A	F	C	D	I	G	H
C	C	D	F	G	H	I	E	A	B
D	D	F	C	H	I	G	A	B	E
F	F	C	D	I	G	H	B	E	A
G	G	H	I	E	A	B	C	D	F
H	H	I	G	A	B	E	D	F	C
I	I	G	H	B	E	A	F	C	D

Z_{10}	E	A	B	C	D	F	G	H	I	J
E	E	A	B	C	D	F	G	H	I	J
A	A	B	C	D	F	G	H	I	J	E
B	B	C	D	F	G	H	I	J	E	A
C	C	D	F	G	H	I	J	E	A	B
D	D	F	G	H	I	J	E	A	B	C
F	F	G	H	I	J	E	A	B	C	D
G	G	H	I	J	E	A	B	C	D	F
H	H	I	J	E	A	B	C	D	F	G
I	I	J	E	A	B	C	D	F	G	H
J	J	E	A	B	C	D	F	G	H	I

D_5	E	A	B	C	D	F	G	H	I	J
E	E	A	B	C	D	F	G	H	I	J
A	A	B	C	D	E	G	H	I	J	F
B	B	C	D	E	A	H	I	J	F	G
C	C	D	E	A	B	I	J	F	G	H
D	D	E	A	B	C	J	F	G	H	I
F	F	J	I	H	G	E	D	C	B	A
G	G	F	J	I	H	A	E	D	C	B
H	H	G	F	J	I	B	A	E	D	C
I	I	H	G	F	J	C	B	A	E	D
J	J	I	H	G	F	D	C	B	A	E

Στη θεωρία των ομάδων δύο *ισόμορφες* ομάδες, που ως τέτοιες έχουν την *ίδια τάξη*, τα στοιχεία τους έχουν τις ίδιες περιόδους και μεταξύ των στοιχείων τους υπάρχει μια *ένα προς ένα αντιστοιχία*, έχουν επίσης τον *ίδιο πίνακα πολλαπλασιασμού*, δηλαδή το γινόμενο δύο στοιχείων στη μια ομάδα αντιστοιχεί με το γινόμενο των αντιστοιχων στοιχείων στην άλλη. Οποιαδήποτε ομάδα με τάξη *b* πρέπει να είναι ισόμορφη με μια από τις αφηρημένες ομάδες με την ίδια τάξη και συνεπώς να υιοθετεί τον αντίστοιχο πίνακα πολλαπλασιασμού.

Με βάση τα παραπάνω η κατάστρωση του πίνακα πολλαπλασιασμού μιας οποιαδήποτε ομάδας δεν απαιτεί τον υπολογισμό όλων των b^2 γινομένων μεταξύ των στοιχείων της, αλλά συνίσταται στην εύρεση της αφηρημένης ομάδας (Πίνακας 5.1.1β) με την οποία είναι ισόμορφη, την αντιστοίχιση των στοιχείων της με τα στοιχεία της αφηρημένης ομάδας και τέλος την κατάστρωση του πίνακα πολλαπλασιασμού της με βάση τον πίνακα πολλαπλασιασμού της αφηρημένης ομάδας ("γΠίνακας 5.2.1a). Επειδή οι αφηρημένες ομάδες για κάθε τάξη *b* διαφοροποιούνται ως προς τις περιόδους των στοιχείων τους, η εύρεση της ισόμορφης αφηρημένης ομάδας για μια ομάδα βασίζεται μόνο στην τάξη της και τις περιόδους των στοιχείων της.

Για παράδειγμα, στην ομάδα $\{1, -1, i, -i\}$ με τάξη $b=4$, πράξη συνδυασμού τον αλγεβρικό πολλαπλασιασμό και στοιχείο ταυτότητας $E = 1$ ισχύει $\sigma(1)=1$, $\sigma(-1)=2$, $\sigma(i)=4$ και $\sigma(-i)=4$ εφόσον $1^2=(-1)^2=i^4=(-i)^4=1$. Έτσι, η ομάδα αυτή έχει ένα στοιχείο με περίοδο 1, ένα με περίοδο 2 και δύο με περίοδο 4 και συνεπώς είναι ισόμορφη της αφηρημένης ομάδας Z_4 με $\sigma(E)=1$, $\sigma(B)=2$, $\sigma(A)=4$ και $\sigma(C) = 4$ και υιοθετεί τον ίδιο πίνακα πολλαπλασιασμού. Με βάση την αντιστοιχία $E=1$, $A=i$, $B=-1$ και $C=-i$ ο πίνακας πολλαπλασιασμού της ομάδας θα είναι ο παρακάτω (Πίνακας α), ο οποίος είναι προφανώς μαθηματικά ορθός. Στην περίπτωση που υιοθετηθεί η εναλλακτική αντιστοιχία $E = 1$, $A = -i$, $B = -1$ και $C = i$, προκύπτει ένας άλλος πίνακας πολλαπλασιασμού (Πίνακας β), ο οποίος είναι επίσης μαθηματικά ορθός και ισότιμος με τον προηγούμενο (Πίνακα α) αφού προκύπτει από αυτόν με απλή ανταλλαγή δύο σειρών και δύο στηλών.

	1	i	-1	-i
1	1	i	-1	-i
i	i	-1	-i	1
-1	-1	-i	1	i
-i	-i	1	i	-1

Πίνακας α

	1	-i	-1	i
1	1	-i	-1	i
-i	-i	-1	i	1
-1	-1	i	1	-i
i	i	1	-i	-1

Πίνακας β

Στο παραπάνω παράδειγμα ο αναζητούμενος πίνακας πολλαπλασιασμού είναι προφανής, καθόσον προκύπτει και με απλές μαθηματικές πράξεις. Η μεθοδολογία όμως αυτή θα αποδειχθεί εξαιρετικά χρήσιμη κατά την κατάστρωση των πινάκων πολλαπλασιασμού των ομάδων σημείου στα πλαίσια της μοριακής συμμετρίας.

5.2.2 Πίνακας Πολλαπλασιασμού Ομάδων Σημείου

Για κάθε μια από τις ομάδες σημείου που περιγράφηκαν διεξοδικά στο προηγούμενο κεφάλαιο εφόσον αποτελεί μια μαθηματική ομάδα υπάρχει ένας πίνακας πολλαπλασιασμού που αποτελεί χαρακτηριστικό της ομάδας σημείου. Η κατάστρωσή του απαιτεί την εύρεση του αποτελέσματος όλων των h^2 συνδυασμών των h διεργασιών συμμετρίας που όπως είδαμε στην παράγραφο 3.10 είναι μια επίπονη διαδικασία. Με τη βοήθεια όμως των πορισμάτων της θεωρίας των ομάδων και ιδιαίτερα της ισομορφίας των ομάδων, η κατάστρωση του πίνακα πολλαπλασιασμού διευκολύνεται σημαντικά.

Μια ομάδα σημείου με τάξη h ως μαθηματική ομάδα θα είναι *ισόμορφη* με μια από τις αφηρημένες ομάδες με την ίδια τάξη h του Πίνακα 5.1.1β και συνεπώς θα έχει τον ίδιο πίνακα πολλαπλασιασμού. Στον Πίνακα 5.2.2.a φαίνονται όλες οι ισομορφίες μεταξύ των ομάδων σημείου. Επίσης δίνονται και οι ισομορφίες των ομάδων σημείου με τάξη $h \leq 10$ με τις αφηρημένες ομάδες του Πίνακα 5.1.1β. Κάθε σειρά του πίνακα των ισομορφιών (Πίνακα 5.2.2.a) δίνει την αφηρημένη και τις ομάδες σημείου που είναι *ισόμορφες*.

Πίνακας 5.2.2a. Πίνακας ισομορφιών αφηρημένων ομάδων ($h \leq 10$) και ομάδων σημείου

Τάξη	Αφηρημένη ομάδα	C_n	C_{nv}	C_{nh}	S_{2n}	D_n	D_{nd}	D_{nh}	Κυβικές	Εικοσαεδρικές
1	Z_1	C_1								
2	Z_2	C_2		C_s	C_i					
3	Z_3	C_3								
4	Z_4	C_4			S_4					
	$Z_2 \times Z_2$		C_{2h}			C_{2v}	D_2			
5	Z_5	C_5								
6	Z_6	C_6		C_{3h}	S_6					
	S_3		C_{3v}			D_3				
7	Z_7	C_7								
8	Z_8	C_8			S_8					
	$Z_4 \times Z_2$			C_{4h}						
	$Z_2 \times Z_2 \times Z_2$							D_{2h}		
	D_4		C_{4v}			D_4	D_{2d}			
10	Z_{10}			C_{5h}						
	D_5		C_{5v}			D_5				
12				C_{6h}						
			C_{6v}			D_6	D_{3d}	D_{3h}		
									T	
14						D_7				
16						D_8	D_{4d}			
								D_{4h}		
20							D_{5d}	D_{5h}		
24							D_{6d}			
								D_{6h}		
									O, T_d	
									T_h	
48									O_h	
60										I
120										I_h

Με βάση τα παραπάνω, η κατάστρωση του πίνακα πολλαπλασιασμού μιας ομάδας σημείου καθίσταται απλούστατη και συνίσταται στα παρακάτω βήματα

1. Εύρεση της τάξης h της ομάδας σημείου.
2. Εύρεση της περιόδου κάθε διεργασίας συμμετρίας της ομάδας σημείου.
3. Εύρεση της ισόμορφης αφηρημένης ομάδας με την ίδια τάξη από τον Πίνακα 5.2.2a.
4. Αντιστοίχιση κάθε στοιχείου E, A, B, \dots της ισόμορφης αφηρημένης ομάδας με μια διεργασία συμμετρίας της ομάδας σημείου με βάση πάντα τις περιόδους τους.

5. Κατάστρωση του πίνακα πολλαπλασιασμού της ομάδας σημείου με απλή αντικατάσταση των στοιχείων E, A, B, \dots του πίνακα πολλαπλασιασμού της ισόμορφης αφηρημένης ομάδας με τις αντίστοιχες διεργασίες συμμετρίας. Στη συνέχεια, σε εφαρμογή των παραπάνω, θα καταστρωθούν οι πίνακες πολλαπλασιασμού των ομάδων σημείου C_{nh} και S_4 .

Η ομάδα σημείου C_{2h} έχει τάξη 4 και στοιχεία της είναι οι διεργασίες $\{E, C_2, i, \sigma_h\}$. Με βάση τον Πίνακα 5.1.2a οι περίοδοι των διεργασιών συμμετρίας είναι $o(E)=1, o(C_2)=2, o(i)=2$ και $o(\sigma_h)=2$. Έτσι, η ομάδα αυτή έχει ένα στοιχείο με περίοδο 1 και τρία με περίοδο 2 και συνεπώς, με βάση τον Πίνακα 5.1.1β, είναι ισόμορφη της αφηρημένης ομάδας $Z_2 \times Z_2$ και υιοθετεί τον ίδιο πίνακα πολλαπλασιασμού. Αυτό προκύπτει επίσης και από τον Πίνακα 5.2.2a. Με βάση την αντιστοιχία $E=E, A=C_2, B=i$ και $C=\sigma_h$ και τον πίνακα πολλαπλασιασμού της ομάδας $Z_2 \times Z_2$ (Πίνακας 5.2.1a), ο πίνακας πολλαπλασιασμού της ομάδας C_{nh} θα είναι ο παρακάτω. Η επιβεβαίωση της ορθότητάς του με εκτέλεση των συνδυασμών των διεργασιών συμμετρίας που αντιστοιχούν σε κάθε στοιχείο του αφήνεται ως άσκηση.

$Z_2 \times Z_2$	E	A	B	C	C_{nh}	E	C_2	i	σ_h
E	E	A	B	C	E	E	C_2	i	σ_h
A	A	E	C	B	C_2	C_2	E	σ_h	i
B	B	C	E	A	i	i	σ_h	E	C_2
C	C	B	A	E	σ_h	σ_h	i	C_2	E

Η ομάδα σημείου S_4 έχει τάξη 4 και στοιχεία της είναι οι διεργασίες $\{E, S_4, C_2, S_4^3\}$. Με βάση τον Πίνακα 5.1.2a οι περίοδοι των διεργασιών συμμετρίας είναι $o(E) = 1, o(S_4) = 4, o(C_2) = 2$ και $o(S_4^3) = 4$. Έτσι, η ομάδα αυτή έχει ένα στοιχείο με περίοδο 1, ένα με περίοδο 2 και δύο με περίοδο 4 και συνεπώς, με βάση τον Πίνακα 5.1.1β, είναι ισόμορφη της αφηρημένης ομάδας Z_4 και υιοθετεί τον ίδιο πίνακα πολλαπλασιασμού. Με βάση την αντιστοιχία $E = E, A = S_4, B = C_2$ και $C = S_4^3$ και τον πίνακα πολλαπλασιασμού της ομάδας Z_4 (Πίνακας 5.2.1a), ο πίνακας πολλαπλασιασμού της ομάδας S_4 θα είναι ο παρακάτω. Η επιβεβαίωση της ορθότητάς του με εκτέλεση των συνδυασμών των διεργασιών συμμετρίας που αντιστοιχούν σε κάθε στοιχείο του αφήνεται επίσης ως άσκηση.

Z_4	E	A	B	C	S_4	E	S_4	C_2	S_4^3
E	E	A	B	C	E	E	S_4	C_2	S_4^3
A	A	B	C	E	S_4	S_4	C_2	S_4^3	E
B	B	C	E	A	C_2	C_2	S_4^3	E	S_4
C	C	E	A	B	S_4^3	S_4^3	E	S_4	C_2

5.3 Αβελιανές Ομάδες

5.3.1 Αβελιανές Μαθηματικές Ομάδες

Μια μαθηματική ομάδα είναι *αβελιανή* όταν όλα τα στοιχεία της *αντιμετατίθενται*, δηλαδή $AB = BA$. Από τις αφηρημένες ομάδες του Πίνακα 5.1.1β αβελιανές είναι μόνον οι ομάδες της μορφής Z_n και $Z_m \times Z_m \times \dots$

Παράδειγμα αβελιανής ομάδας είναι η ομάδα $\{1, i, -1, -i\}$ με τάξη $b=4$ και πράξη συνδυασμού τον πολλαπλασιασμό, ο πίνακας πολλαπλασιασμού της οποίας φαίνεται δεξιά. Από το παράδειγμα αυτό, αλλά και τους πίνακες πολλαπλασιασμού των αφηρημένων ομάδων του Πίνακα 5.2.1a, είναι προφανές ότι ο πίνακας πολλαπλασιασμού μιας αβελιανής ομάδας είναι συμμετρικός ως προς την διαγώνιο του.

	1	i	-1	-i
1	1	i	-1	-i
i	i	-1	-i	1
-1	-1	-i	1	i
-i	-i	1	i	-1

5.3.2 Αβελιανές Ομάδες Σημείου

Μια ομάδα σημείου είναι *αβελιανή* όταν όλες οι διεργασίες της *αντιμετατίθενται*, δηλαδή $\mathbf{XY} = \mathbf{YX}$. Αβελιανές ομάδες σημείου είναι μόνον οι ομάδες σημείου: C_n , S_{2n} , C_{nh} , C_{2v} , D_2 και D_{2h} . Είναι προφανές ότι ο πίνακας πολλαπλασιασμού μιας αβελιανής ομάδας σημείου, όπως αυτός της ομάδας σημείου C_{2v} που φαίνεται δεξιά, είναι συμμετρικός ως προς την διαγώνιο του.

C_{2v}	E	C_2	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$
E	E	C_2	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$
C_2	C_2	E	$\sigma(yz)$	$\sigma(xz)$
$\sigma(xz)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$	E	C_2
$\sigma(yz)$	$\sigma(yz)$	$\sigma(xz)$	C_2	E

5.4 Κυκλικές Ομάδες

5.4.1 Κυκλικές Μαθηματικές Ομάδες

Μια μαθηματική ομάδα με τάξη h είναι *κυκλική* όταν περιέχει ένα στοιχείο A τέτοιο ώστε $A^h = E$ και όλες τις δυνάμεις του μέχρι h , δηλαδή $A^1, A^2, \dots, A^{h-1}, A^h$. Το στοιχείο A καλείται *γεννήτρια* της ομάδας. Τα στοιχεία των κυκλικών ομάδων γράφονται με πρώτη πάντα την ταυτότητα και στη συνέχεια κατά αύξουσα σειρά τις δυνάμεις της γεννήτριας, δηλαδή $\{E, A^1, A^2, \dots, A^{h-1}\}$. Για παράδειγμα τα στοιχεία της κυκλικής ομάδας με γεννήτρια το i και τάξη 4, όπου $i^4 = 1 = E$, θα είναι τα i^1, i^2, i^3 και i^4 , δηλαδή $\{1, i, -1, -i\}$. Είναι προφανές ότι οι κυκλικές ομάδες είναι και αβελιανές, καθώς για τις δυνάμεις του στοιχείου τις γεννήτριας ισχύει πάντα η αντιμεταθετική ιδιότητα, $A^n A^m = A^m A^n$.

Από τις αφηρημένες ομάδες του Πίνακα 5.1.1β κυκλικές είναι μόνον οι ομάδες της μορφής Z_n . Από τους πίνακες πολλαπλασιασμού των αφηρημένων ομάδων του Πίνακα 5.2.1a, αλλά και από αυτόν της ομάδας $\{1, i, -1, -i\}$ που δίνεται παρακάτω, μπορεί να διαπιστωθεί εύκολα ότι *κάθε σειρά ή στήλη του πίνακα πολλαπλασιασμού μιας κυκλικής ομάδας αποτελεί μια κυκλική εναλλαγή των στοιχείων της με τη σειρά που εμφανίζονται στις επικεφαλίδες του πίνακα, αρχίζοντας βέβαια από διαφορετικό στοιχείο*.

5.4.2 Κυκλικές Ομάδες Σημείου

Μια ομάδα σημείου με τάξη h είναι *κυκλική* όταν περιέχει μια διεργασία X τέτοια ώστε $X^h = E$ και όλες τις δυνάμεις της μέχρι h $\{X^1, X^2, \dots, X^{h-1}, X^h\}$. Η διεργασία X καλείται *γεννήτρια* της ομάδας σημείου.

Κυκλικές ομάδες σημείου είναι οι ομάδες σημείου: C_1, C_s, C_i, C_n και S_{2n} . Έτσι, η 4^{ης} τάξης κυκλική ομάδα σημείου C_4 έχει ως γεννήτρια τη διεργασία περιστροφής C_4 και στοιχεία τις διεργασίες $C_4^1 = C_4, C_4^2 = C_2, C_4^3 = C_4^3$ και $C_4^4 = E$.

Οι κυκλικές ομάδες σημείου είναι και αβελιανές, καθώς $X^m X^n = X^n X^m$. Όπως και στις μαθηματικές ομάδες κάθε σειρά ή στήλη του πίνακα πολλαπλασιασμού μιας κυκλικής ομάδας σημείου αποτελεί μια κυκλική εναλλαγή των διεργασιών της με τη σειρά που εμφανίζονται στις επικεφαλίδες του πίνακα, αρχίζοντας βέβαια από διαφορετική διεργασία. Αυτό είναι προφανές στον πίνακα πολλαπλασιασμού της κυκλικής ομάδας C_4 που δίνεται δεξιά.

C_4	E	C_4	C_2	C_4^3
E	E	C_4	C_2	C_4^3
C_4	C_4	C_2	C_4^3	E
C_2	C_2	C_4^3	E	C_4
C_4^3	C_4^3	E	C_4	C_2

5.5 Υποομάδες

5.5.1 Υποομάδες Μαθηματικών Ομάδων

Δοθείσης μιας ομάδας H με μια πράξη συνδυασμού, μια ομάδα G καλείται *υποομάδα* της H όταν τα στοιχεία της συνιστούν ομάδα με την ίδια πράξη συνδυασμού και αποτελούν ένα υποσύνολο των στοιχείων της H . Για παράδειγμα, η ομάδα $G = \{1, -1\}$ αποτελεί υποομάδα της $H = \{1, i, -1, -i\}$ με πράξη συνδυασμού τον πολλαπλασιασμό, διότι η G αποτελεί η ίδια ομάδα και περιέχει υποσύνολο των στοιχείων της H . Αντίθετα, η ομάδα

$G_1 = \{i, -i\}$ δεν αποτελεί υποομάδα της H διότι, παρόλο που περιέχει υποσύνολο των στοιχείων της H , η ίδια δεν αποτελεί ομάδα (π.χ. $i \cdot (-i) = 1$ και το 1 δεν αποτελεί στοιχείο της ομάδας G_1).

Πίνακας 5.5.1α. Υποομάδες των αφηρημένων ομάδων με $h=4, 6, 8, 9$ και 10 .

Ομάδα		Υποομάδες		Στοιχεία υποομάδων (Πίνακας 5.2.1α)
Τάξη	Τύπος	Τάξη	Τύπος	
4	Z_4	2	Z_2	{E,B}
	$Z_2 \times Z_2$	2	Z_2	{E,A}, {E,B}, {E,C}
6	Z_6	2	Z_2	{E,C}
		3	Z_3	{E,B,D}
	S_3	2	Z_2	{E,C}, {E,D}, {E,F}
		3	Z_3	{E,A,B}
8	Z_8	2	Z_2	{E,D}
		4	Z_4	{E,B,D,G}
	$Z_4 \times Z_2$	2	Z_2	{E,B}, {E,D}, {E,G}
		4	Z_4	{E,A,B,C}, {E,F,G,H}, {E,B,D,G}
	$Z_2 \times Z_2 \times Z_2$	2	Z_2	{E,A}, {E,B}, {E,C}, {E,D}, {E,G}, {E,H}
		4	$Z_2 \times Z_2$	{E,A,B,C}, {E,A,D,F}, {E,A,G,H}, {E,B,D,G}, {E,B,F,H}, {E,C,D,H}, {E,C,F,G}
	D_4	2	Z_2	{E,B}, {E,D}, {E,F}, {E,G}, {E,H}
		4	$Z_2 \times Z_2$	{E,B,D,G}, {E,A,B,C}, {E,B,F,H}
Q	2	Z_2	{E,B}	
	4	Z_4	{E,A,B,C}, {E,B,D,G}, {E,B,F,H}	
9	Z_9	3	Z_3	{E,C,G}
	$Z_3 \times Z_3$	3	Z_3	{E,A,B}, {E,C,G}, {E,D,I}, {E,F,H}
10	Z_{10}	2	Z_2	{E,F}
		5	Z_5	{E,B,D,G,H}
	D_5	2	Z_2	{E,F}, {E,G}, {E,H}, {E,I}, {E,J}
		5	Z_5	{E,A,B,C,D}

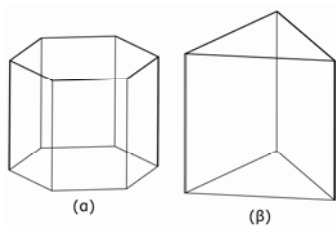
Η τάξη της υποομάδας μιας ομάδας με τάξη h συμβολίζεται ως g και αποδεικνύεται ότι είναι πάντα ακέραιος διαιρέτης του h , δηλαδή $h/g = k$ (k , ακέραιος). Έτσι, μια ομάδα τάξης 6 μπορεί να έχει υποομάδες με τάξεις 3, 2 και 1. Κάθε ομάδα έχει ως υποομάδα τον εαυτό της και την ομάδα πρώτης τάξης που έχει ως στοιχείο μόνον την ταυτότητα. Από τις αφηρημένες ομάδες των Πίνακα 5.1.1β οι ομάδες με τάξη $h = 1, 2, 3, 5$ και 7 έχουν ως υποομάδες μόνον τον εαυτό τους και την ομάδα πρώτης τάξης που έχει ως στοιχείο μόνον την ταυτότητα. Στον Πίνακα 5.5.1α δίνονται όλες οι δυνατές υποομάδες των υπόλοιπων αφηρημένων ομάδων εκτός των προφανών υποομάδων με τάξη $g=1$ και h .

5.5.2 Υποομάδες Ομάδων Σημείου

Μια ομάδα σημείου G καλείται υποομάδα της H όταν οι διεργασίες που περιέχει συνιστούν ομάδα και αποτελούν ένα υποσύνολο των διεργασιών της H . Η τάξη της υποομάδας μιας ομάδας με τάξη h συμβολίζεται ως g και είναι πάντα ακέραιος διαιρέτης του h , δηλαδή $h/g = k$ (k , ακέραιος).

Η ταυτότητα αποτελεί διεργασία όλων των ομάδων σημείου και συνιστά μόνη της την ομάδα σημείου C_1 . Έτσι, όλες οι ομάδες σημείου έχουν ως υποομάδα την C_1 . Επίσης κάθε ομάδα σημείου έχει ως υποομάδα μια τουλάχιστον κυκλική και μια αβελιανή ομάδα σημείου.

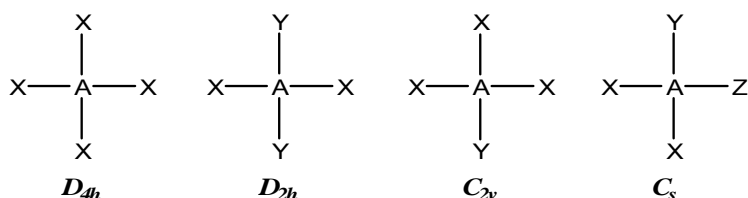
Στον Πίνακα 5.5.2α δίνονται όλες οι δυνατές υποομάδες των ομάδων σημείου. Σε κάθε σειρά επισημαίνονται με (x) ή (+) οι υποομάδες μιας ομάδας σημείου. Με (x) επισημαίνονται οι κύριες υποομάδες μιας ομάδας υψηλής συμμετρίας, ενώ με (+) οι υποομάδες των κυρίων υποομάδων. Έτσι, στη σειρά της ομάδας O_h υπάρχει (x) στην ομάδα T_h , που σημαίνει ότι η T_h είναι κύρια υποομάδα της O_h και (+) στην ομάδα D_{2h} που είναι κύρια υποομάδα της T_h και συνεπώς υποομάδα και της O_h .



Η έννοια της υποομάδας μπορεί να δώσει απάντηση στο φαινομενικά απλό ερώτημα «Είναι μια μοριακή διαμόρφωση ή γεωμετρία *περισσότερο συμμετρική* από μια άλλη». Για παράδειγμα ποιο από τα στερεά (α) και (β) είναι περισσότερο συμμετρικό; Με βάση τις ομάδες σημείου των στερεών περισσότερο συμμετρικό είναι το στερεό (α) επειδή ανήκει στην ομάδα σημείου D_{6h} , ενώ το (β) ανήκει στην ομάδα σημείου D_{3h} που είναι υποομάδα της D_{6h} .

Αν δε λάβουμε υπόψιν τη σχέση ομάδας – υποομάδας η απάντηση στο παραπάνω ερώτημα θα βασίζεται σε υποκειμενικά κριτήρια αισθητικής και αντίληψης του καθενός και όχι σε κάτι αντικειμενικά τεκμηριωμένο.

Η γνώση των υποομάδων μιας ομάδας έχει εξαιρετική σημασία καθόσον, η μοριακή δομή που προκύπτει όταν ένα μόριο περιστρέφεται εσωτερικά, δονείται, υφίσταται υποκατάσταση, διασπάται ή παραμορφώνεται, υιοθετεί πάντα μια ομάδα σημείου που είναι υποομάδα της αρχικής ομάδας σημείου. Για παράδειγμα, στο Σχήμα 5.5.2α δίνονται μια σειρά υποκατεστημένων μοριακών δομών που προκύπτουν από το τετραγωνικό μόριο AX_4 που ανήκει στην ομάδα σημείου D_{4h} . Εύκολα διαπιστώνεται ότι όλες αυτές οι δομές ανήκουν σε ομάδες σημείου που είναι υποομάδες της D_{4h} .



Σχήμα 5.5.2α Υποκατεστημένες δομές που προκύπτουν από το τετραγωνικό μόριο AX_4 .

5.6 Μετασχηματισμός Ομοιότητας και Κλάσεις Ομάδων

5.6.1 Κλάσεις Μαθηματικών Ομάδων

Αν A και X είναι στοιχεία μιας ομάδας το στοιχείο B για το οποίο ισχύει:

$$B = X^{-1}AX$$

είναι επίσης στοιχείο της ομάδας και καλείται *μετασχηματισμός ομοιότητας* του A από το X . Τα στοιχεία A και B καλούνται *σζυγή στοιχεία*. Αποδεικνύονται επίσης οι παραπάνω ιδιότητες:

1. Κάθε στοιχείο μιας ομάδας είναι σζυγές με τον εαυτό του, δηλαδή για κάθε στοιχείο A της ομάδας υπάρχει ένα τουλάχιστον στοιχείο X τέτοιο ώστε $A = X^{-1}AX$.
2. Αν το A είναι σζυγές του B τότε και το B είναι σζυγές του A , δηλαδή αν για τα στοιχεία A, B και X μιας ομάδας ισχύει $B = X^{-1}AX$, τότε υπάρχει ένα τουλάχιστον στοιχείο Y τέτοιο ώστε $A = Y^{-1}BY$.
3. Αν το A είναι σζυγές των B και Γ τότε τα B και Γ είναι επίσης σζυγή μεταξύ τους.

Τα στοιχεία μιας ομάδας ομαδοποιούνται σε ομάδες σζυγών μεταξύ τους στοιχείων που καλούνται *κλάσεις*. Η τάξη μιας κλάσης, δηλαδή το πλήθος των στοιχείων της, είναι πάντα ακέραιος διαιρέτης της τάξης της ομάδας. Τα στοιχεία μιας κλάσης συμπεριφέρονται με τον ίδιο τρόπο και έτσι συνήθως μελετάμε ένα μέλος της κλάσης αντί κάθε μέλος της ξεχωριστά.

Για να βρούμε τις κλάσεις μιας ομάδας πρέπει να υπολογίσουμε τους μετασχηματισμούς ομοιότητας όλων των στοιχείων της από όλα τα υπόλοιπα στοιχεία και στη συνέχεια να εντοπίσουμε τα στοιχεία που είναι σζυγή. Προς τούτο είναι χρήσιμη η κατάστρωση ενός πίνακα μετασχηματισμού ομοιότητας της ομάδας που είναι ανάλογος του πίνακα πολλαπλασιασμού αλλά κάθε στοιχείο του αποτελεί το μετασχηματισμό ομοιότητας του στοιχείου στήλης από το στοιχείο σειράς. Για παράδειγμα, ο Πίνακας (α) παρακάτω είναι ο πίνακας μετασχηματισμών ομοιότητας της αφηρημένης ομάδας έκτης τάξης S_3 .

Θεωρία ομάδων και μοριακή συμμετρία

X	X ⁻¹ EX	X ⁻¹ AX	X ⁻¹ BX	X ⁻¹ CX	X ⁻¹ DX	X ⁻¹ FX	X	X ⁻¹ EX	X ⁻¹ AX	X ⁻¹ BX	X ⁻¹ CX	X ⁻¹ DX	X ⁻¹ FX
E	E ⁻¹ EE	E ⁻¹ AE	E ⁻¹ BE	E ⁻¹ CE	E ⁻¹ DE	E ⁻¹ FE	E	E	A	B	C	D	F
A	A ⁻¹ EA	A ⁻¹ AA	A ⁻¹ BA	A ⁻¹ CA	A ⁻¹ DA	A ⁻¹ FA	A	E	A	B	F	C	D
B	B ⁻¹ EB	B ⁻¹ AB	B ⁻¹ BB	B ⁻¹ CB	B ⁻¹ DB	B ⁻¹ FB	B	E	A	B	D	F	C
C	C ⁻¹ EC	C ⁻¹ AC	C ⁻¹ BC	C ⁻¹ CC	C ⁻¹ DC	C ⁻¹ FC	C	E	B	A	C	F	D
D	D ⁻¹ ED	D ⁻¹ AD	D ⁻¹ BD	D ⁻¹ CD	D ⁻¹ DD	D ⁻¹ FD	D	E	B	A	F	D	C
F	F ⁻¹ EF	F ⁻¹ AF	F ⁻¹ BF	F ⁻¹ CF	F ⁻¹ DF	F ⁻¹ FF	F	E	B	A	D	C	F

Πίνακας α

Πίνακας β

Από τον πίνακα πολλαπλασιασμού της ομάδας S_3 (Πίνακας 5.2.1a) προκύπτει ότι $E^{-1}=E, A^{-1}=B, B^{-1}=A, C^{-1}=C, D^{-1}=D, E^{-1}=F$. Έτσι, ο Πίνακας (α) μετατρέπεται εύκολα στον Πίνακα (β). Με απλή παρατήρηση των σκιασμένων περιοχών του πίνακα μετασχηματισμών προκύπτει ότι το στοιχείο E αποτελεί μόνο του μια κλάση με τάξη 1, τα στοιχεία $\{A, B\}$ είναι συζυγή μεταξύ τους και συνιστούν μια κλάση με τάξη 2 και τα στοιχεία $\{C, D, F\}$ είναι συζυγή μεταξύ τους και συνιστούν μια κλάση με τάξη 3.

Σε όλες τις ομάδες το στοιχείο της ταυτότητας E αποτελεί μόνο του μια κλάση με τάξη 1. Στις κυκλικές και τις αβελιανές ομάδες κάθε στοιχείο αποτελεί μόνο του μια κλάση με τάξη 1. Τέλος, οι ισόμορφες ομάδες έχουν τον ίδιο πίνακα μετασχηματισμών ομοιότητας.

5.6.2 Κλάσεις Ομάδων Σημείου

Όπως και στις μαθηματικές ομάδες, στις ομάδες σημείου ορίζεται ο μετασχηματισμός ομοιότητας $Z = X^{-1}YX$ οποιασδήποτε διεργασίας Y από μια διεργασία X . Οι διεργασίες Y και Z καλούνται *συζυγείς διεργασίες* και κάθε υποσύνολο διεργασιών που είναι συζυγείς μεταξύ τους αποτελούν μια *κλάση* της ομάδας σημείου. Για κάθε ομάδα σημείου υπάρχει ένας χαρακτηριστικός πίνακας μετασχηματισμών ομοιότητας των διεργασιών συμμετρίας.

Η κατάστρωση του πίνακα μετασχηματισμών ομοιότητας μπορεί να γίνει με δύο τρόπους. Σύμφωνα με τον πρώτο καταστρώνεται κατ' αρχήν ο πίνακας μετασχηματισμών ομοιότητας της ισόμορφης αφηρημένης ομάδας με την ίδια τάξη και στη συνέχεια αντικαθίστανται τα στοιχεία του με τις αντίστοιχες διεργασίες συμμετρίας, όπως περιγράφεται στη συνέχεια.

Η ομάδα σημείου C_{3v} έχει τάξη 6 και στοιχεία τις διεργασίες $\{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$. Με βάση τον Πίνακα 5.1.2a οι περίοδοι των διεργασιών συμμετρίας είναι $o(E) = 1, o(C_3) = 3, o(C_3^2) = 3, o(\sigma_v) = 2, o(\sigma_v') = 2$ και $o(\sigma_v'') = 2$. Έτσι, η ομάδα αυτή έχει ένα στοιχείο με περίοδο 1, δύο με περίοδο 3 και τρεις με περίοδο 2 και συνεπώς, με βάση τον Πίνακα 5.1.1β, είναι ισόμορφη της αφηρημένης ομάδας S_3 και υιοθετεί τον ίδιο πίνακα μετασχηματισμών ομοιότητας με αυτήν. Ο πίνακας αυτός για την ομάδα S_3 καταστρώθηκε ήδη και είναι ο παρακάτω Πίνακας (α). Μετά από αντικατάσταση των στοιχείων, με βάση την αντιστοιχία $E = E, A = C_3, B = C_3^2, C = \sigma_v, D = \sigma_v', F = \sigma_v''$, προκύπτει εύκολα ο Πίνακας (β) που αποτελεί τον πίνακα μετασχηματισμών ομοιότητας της ομάδας σημείου C_{3v} .

X	X ⁻¹ EX	X ⁻¹ AX	X ⁻¹ BX	X ⁻¹ CX	X ⁻¹ DX	X ⁻¹ FX
E	E	A	B	C	D	F
A	E	A	B	F	C	D
B	E	A	B	D	F	C
C	E	B	A	C	F	D
D	E	B	A	F	D	C
F	E	B	A	D	C	F

Πίνακας α

X	X ⁻¹ EX	X ⁻¹ C ₃ X	X ⁻¹ C ₃ ² X	X ⁻¹ σ _v X	X ⁻¹ σ _v 'X	X ⁻¹ σ _v ''X
E	E	C ₃	C ₃ ²	σ _v	σ _v '	σ _v ''
C ₃	E	C ₃	C ₃ ²	σ _v ''	σ _v	σ _v '
C ₃ ²	E	C ₃ ²	C ₃	σ _v	σ _v ''	σ _v '
σ _v	E	C ₃ ²	C ₃	σ _v	σ _v ''	σ _v '
σ _v '	E	C ₃ ²	C ₃	σ _v ''	σ _v '	σ _v
σ _v ''	E	C ₃	C ₃	σ _v '	σ _v	σ _v ''

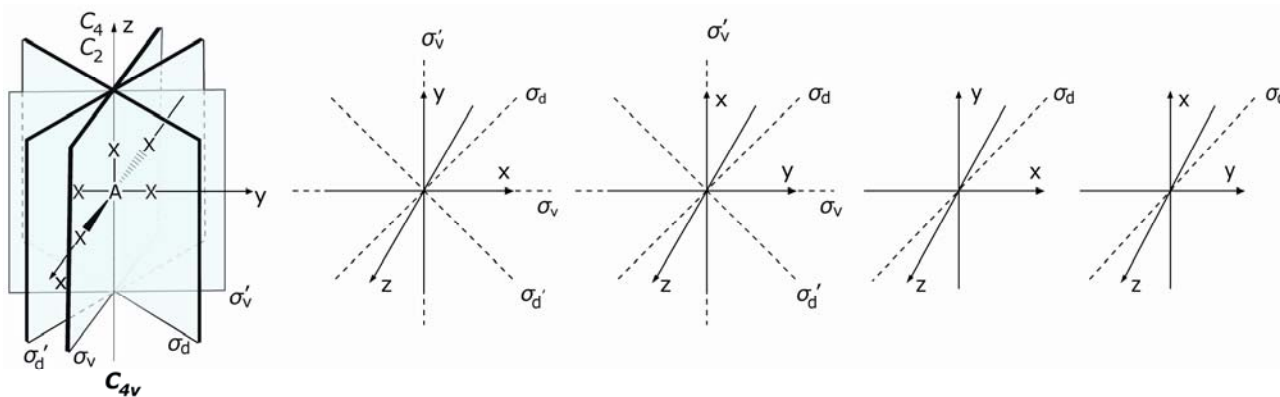
Πίνακας β

Με απλή παρατήρηση των σκιασμένων περιοχών του παραπάνω πίνακα μετασχηματισμών προκύπτει ότι στην ομάδα σημείου C_{3v} το στοιχείο E αποτελεί μόνο του μια κλάση με τάξη 1, τα στοιχεία $\{C_3, C_3^2\}$ είναι συζυγή μεταξύ τους και συνιστούν μια κλάση με τάξη 2 και τα στοιχεία $\{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ είναι συζυγή μεταξύ τους και συνιστούν μια κλάση με τάξη 3.

Κατά την καταγραφή των στοιχείων των ομάδων σημείου τα στοιχεία κάθε κλάσης ομαδοποιούνται και κάθε κλάση γράφεται με την τάξη της κλάσης μπροστά από το σύμβολο της απλούστερης διεργασίας της κλάσης. Έτσι, οι διεργασίες συμμετρίας της ομάδας σημείου C_{3v} γράφονται απλώς ως: $E \ 2C_3 \ 3\sigma_v$.

Ο δεύτερος τρόπος κατάστρωσης του πίνακα μετασχηματισμών ομοιότητας μιας ομάδας σημείου συνίσταται στη συστηματική εύρεση όλων των μετασχηματισμών $Z = X^{-1}YX$ για όλα τα στοιχεία της ομάδας και είναι αρκετά χρονοβόρος. Έτσι, αφήνεται ως άσκηση στον αναγνώστη η εύρεση όλων των μετασχηματισμών ομοιότητας των στοιχείων της ομάδας σημείου C_{3v} , λαμβάνοντας υπόψιν ότι: $E^{-1}=E$, $C_3^{-1}=C_3^2$, $(C_3^2)^{-1}=C_3$, $\sigma_v^{-1}=\sigma_v$, $\sigma_v'^{-1}=\sigma_v'$ και $\sigma_v''^{-1}=\sigma_v''$ για επιβεβαίωση του παραπάνω Πίνακα (β).

Ποια όμως είναι η σημασία των συζυγών διεργασιών συμμετρίας και τελικά της έννοιας των κλάσεων; Ποια είναι η σημασία των όρων «μετασχηματισμός» και «ομοιότητα» στη μοριακή συμμετρία; Η απάντηση σε αυτά τα ερωτήματα έγκειται στη γεωμετρική ερμηνεία των παραπάνω. Σύμφωνα με αυτήν δύο διεργασίες συμμετρίας είναι συζυγείς και ανήκουν στην ίδια κλάση όταν το αποτέλεσμά τους ανταλλάσσεται εάν το σύστημα συντεταγμένων μετατρέπεται σε ένα άλλο με την επίδραση μιας άλλης διεργασίας συμμετρίας της ομάδας σημείου. Για να διευκρινιστεί ο γεωμετρικός αυτός ορισμός ας πάρουμε σαν παράδειγμα την ομάδα σημείου C_{4v} , στην οποία ανήκουν μεταξύ άλλων και τα μόρια του τύπου Ax_5 με δομή τετραγωνικής πυραμίδας. Οι διεργασίες συμμετρίας της ομάδας σημείου και το σύστημα συντεταγμένων φαίνονται στο Σχήμα 5.6.2a. Στο ίδιο σχήμα δίνονται τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας στο το ίδιο σύστημα συντεταγμένων αλλά με τους καρτεσιανούς άξονες x και y τοποθετημένους στο επίπεδο της σελίδας και τον z κάθετο σε αυτή (σύστημα συντεταγμένων A).



Σχήμα 5.6.2a Διεργασίες συμμετρίας της ομάδας σημείου C_{4v} και συστήματα συντεταγμένων .

Το αποτέλεσμα των διεργασιών C_4 και C_4^3 στις συντεταγμένες $[x, y, z]$ ενός σημείου στο χώρο με βάση το σύστημα συντεταγμένων 1 θα είναι:

$$\text{Σύστημα συντεταγμένων A: } C_4[x, y, z] \rightarrow [-y, x, z] \quad C_4^3[x, y, z] \rightarrow [y, -x, z]$$

Σε ένα νέο (μετασχηματισμένο) σύστημα συντεταγμένων (σύστημα συντεταγμένων B) το αποτέλεσμα των ίδιων διεργασιών θα είναι:

$$\text{Σύστημα συντεταγμένων B: } C_4[x, y, z] \rightarrow [y, -x, z] \quad C_4^3[x, y, z] \rightarrow [-y, x, z]$$

Είναι προφανές ότι το αποτέλεσμα των δύο διεργασιών C_4 και C_4^3 ανταλλάσσεται μεταβαίνοντας από το πρώτο στο δεύτερο σύστημα συντεταγμένων. Αλλά, όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.6.2a, το σύστημα συντεταγμένων A μετατρέπεται στο B με την επίδραση μιας τρίτης διεργασίας συμμετρίας της ομάδας σημείου, της σ_d . Έτσι, οι ρόλοι των διεργασιών C_4 και C_4^3 είναι όμοιοι με την αλλαγή του συστήματος συντεταγμένων από την διεργασία σ_d και συνεπώς είναι συζυγείς και αποτελούν μια κλάση. Με άλλα λόγια, αν αλλάξουμε το σύστημα συντεταγμένων με τη διεργασία σ_d , εκτελέσουμε τη διεργασία C_4 (δηλαδή: $C_4\sigma_d$) και επαναφέρουμε το σύστημα συντεταγμένων με τη διεργασία σ_d^{-1} (δηλαδή: $\sigma_d^{-1}C_4\sigma_d$) θα προκύψει το αποτέλεσμα της διεργασίας C_4^3 . Η διαδικασία αυτή δεν είναι τίποτα άλλο από το μετασχηματισμό ομοιότητας $C_4^3 = \sigma_d^{-1}C_4\sigma_d$. Αναλόγως προκύπτει ότι $C_4 = \sigma_d^{-1}C_4^3\sigma_d$.

Από τα παρακάτω αποτελέσματα των διεργασιών σ_v και σ_v' στα δύο συστήματα συντεταγμένων A και B:

$$\text{Σύστημα συντεταγμένων A: } \sigma_v[x, y, z] \rightarrow [x, -y, z] \quad \sigma_v'[x, y, z] \rightarrow [-x, y, z]$$

$$\text{Σύστημα συντεταγμένων B: } \sigma_v[x, y, z] \rightarrow [-x, y, z] \quad \sigma_v'[x, y, z] \rightarrow [x, -y, z]$$

προκύπτει επίσης ότι οι ρόλοι και αυτών είναι όμοιοι με την αλλαγή του συστήματος συντεταγμένων από την διεργασία σ_i και συνεπώς είναι συζυγείς και αποτελούν μια κλάση. Εύκολα διαπιστώνεται ότι και οι διεργασίες σ_i και σ_i' αποτελούν επίσης μια κλάση, ενώ η διεργασίες E και C_2 αποτελούν από μόνες τους κλάση. Έτσι, οι διεργασίες συμμετρίας της ομάδας σημείου C_{4v} μπορούν να γραφούν ως: $E \ 2C_4 \ C_2 \ 2\sigma_v \ 2\sigma_d$.

Ο τρόπος με τον οποίο οι διεργασίες συμμετρίας ομαδοποιούνται σε κλάσεις εξαρτάται μόνον από το είδος των διεργασιών και όχι από την ομάδα σημείου στην οποία αυτές εμφανίζονται. Έτσι, για τα πέντε είδη διεργασιών συμμετρίας ισχύουν τα ακόλουθα.

1. Η ταυτότητα, E , συνιστά από μόνη της την κλάση E .
2. Η αναστροφή, i , συνιστά από μόνη της την κλάση i .
3. Ο κατοπτρισμός σε οριζόντιο επίπεδο, σ_h , συνιστά από μόνος του την κλάση σ_h . Εάν υπάρχουν n επίπεδα σ_v αποτελούν την κλάση $n\sigma_v$, ενώ αν υπάρχουν n επίπεδα σ_d αποτελούν την κλάση $n\sigma_d$.
4. Για κάθε κατάλληλη περιστροφή, C_n , τα ζεύγη δυνάμεων της C_n^m και C_n^{n-m} για $m= 1, 2, \dots, n/2$ ανήκουν στην ίδια κλάση.
5. Για κάθε ακατάλληλη περιστροφή, S_n , τα ζεύγη δυνάμεων της S_n^m και S_n^{n-m} για $m= 1, 2, \dots, n/2$ ανήκουν στην ίδια κλάση.
6. Διεργασίες συμμετρίας διαφορετικού είδους (π.χ. κατοπτρισμός σ και κατάλληλη περιστροφή C_n) ή ίδιου είδους αλλά διαφορετικής τάξης (π.χ. S_n και S_n') ανήκουν πάντα σε διαφορετικές κλάσεις.

Με βάση τα παραπάνω στον Πίνακα 5.6.2α δίνονται οι κλάσεις που αποτελούνται από διεργασίες κατάλληλης και ακατάλληλης περιστροφής και απαντώνται στις ομάδες σημείου.

Πίνακας 5.6.2α. Διεργασίες συμμετρίας κατάλληλης και ακατάλληλης περιστροφής που συνιστούν κλάσεις στις ομάδες σημείου.

Κατάλληλες περιστροφές											
Κλάση	$2C_3$	$2C_4$	$2C_5$	$2C_5^2$	$2C_6$	$2C_8$	$2C_8^3$				
Διεργασίες	$C_3 \ C_3^2$	$C_4 \ C_4^3$	$C_5 \ C_5^4$	$C_5^2 \ C_5^3$	$C_6 \ C_6^5$	$C_8 \ C_8^7$	$C_8^3 \ C_8^5$				
Ακατάλληλες περιστροφές											
Κλάση	$2S_3$	$2S_4$	$2S_5$	$2S_5^2$	$2S_6$	$2S_8$	$2S_8^3$	$2S_{10}$	$2S_{10}^3$	$2S_{12}$	$2S_{12}^5$
Διεργασίες	$S_3 \ S_3^2$	$S_4 \ S_4^3$	$S_5 \ S_5^4$	$S_5^2 \ S_5^3$	$S_6 \ S_6^5$	$S_8 \ S_8^7$	$S_8^3 \ S_8^5$	$S_{10} \ S_{10}^9$	$S_{10}^3 \ S_{10}^7$	$S_{12} \ S_{12}^{10}$	$S_{12}^5 \ S_{12}^7$

Η καταγραφή των διεργασιών συμμετρίας ομαδοποιημένων κατά κλάσεις για όλες τις ομάδες σημείου δίνονται στους πίνακες του Παραρτήματος.

Σύνοψη

1. Ως μαθηματική ομάδα, G , με τάξη h ορίζεται ένα σύνολο από h αντικείμενα ή στοιχεία (A, B, C, \dots) μαζί με έναν κανόνα ή πράξη συνδυασμού (\cdot) με βάση τον οποίον τα στοιχεία αλληλοσυσχετίζονται ($A \cdot B$) για τα οποία ισχύουν οι ιδιότητες της κλειστότητας, της ύπαρξης μοναδιαίου στοιχείου, της επιμεριστικότητας και της ύπαρξης αντιστρόφων.
2. Για κάθε τάξη h υπάρχει πεπερασμένο πλήθος δυνατών ομάδων, οι οποίες καλούνται αφηρημένες ομάδες και διαφέρουν ως προς τις περιόδους των στοιχείων τους.
3. Οι ομάδες σημείου αποτελούν μαθηματικές ομάδες με στοιχεία τις διεργασίες συμμετρίας και έχουν όλες τις ιδιότητες αυτών.
4. Κάθε μαθηματική ομάδα ή ομάδα σημείου με τάξη h είναι ισόμορφη μιας αφηρημένης ομάδας με την ίδια τάξη.
5. Οι πίνακες πολλαπλασιασμού τόσο των μαθηματικών όσο και των ομάδων σημείου καταστρώνονται με βάση τους πίνακες πολλαπλασιασμού των ισόμορφων αφηρημένων ομάδων.
6. Μια μαθηματική ομάδα ή ομάδα σημείου είναι αβελιανή αν όλα τα στοιχεία ή διεργασίες της αντιμετατίθενται.
7. Μια μαθηματική ομάδα ή ομάδα σημείου είναι κυκλική όταν περιέχει ένα στοιχείο A τέτοιο ώστε $A^h = E$ και όλες τις δυνάμεις του μέχρι h , δηλαδή $A^1, A^2, \dots, A^{h-1}, A^h$. Οι κυκλικές ομάδες είναι αβελιανές.
- 8.

9. Μια ομάδα ή ομάδα σημείου \mathbf{G} καλείται *υποομάδα* της \mathbf{H} όταν τα στοιχεία ή οι διεργασίες της συνιστούν ομάδα με την ίδια πράξη συνδυασμού και αποτελούν ένα υποσύνολο των στοιχείων ή διεργασιών της \mathbf{H} .
10. Σε μια μαθηματική ομάδα ή ομάδα σημείου το στοιχείο ή διεργασία $B = X^{-1}AX$ καλείται *μετασχηματισμός ομοιότητας* του A από το X και ανήκει στην ομάδα. Τα A και B καλούνται *συζυγή* στοιχεία ή διεργασίες. Μια ομάδα συζυγών μεταξύ τους στοιχείων ή διεργασιών καλείται *κλάση*.