

6. Εκπροσωπήσεις Ομάδων Σημείου

Διδακτικοί στόχοι

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

- ο καταστρώνετε τις μήτρες εκπροσώπησης των ομάδων σημείου χρησιμοποιώντας διάφορες βάσεις
- ο καταστρώνετε τους χαρακτήρες της εκπροσώπησης μιας ομάδας
- ο αναγνωρίζετε αν μια εκπροσώπηση μητρών είναι αναγώγιμη ή μη

Προαπαιτούμενες γνώσεις

Απλές μαθηματικές έννοιες όπως τριγωνομετρικές σχέσεις και μεθοδολογία πολλαπλασιασμού μητρών. Ευχέρεια στην εφαρμογή των διεργασιών συμμετρίας περιστροφής, στροφοκατοπτρισμού, κατοπτρισμού και αναστροφής. Γνώση των διεργασιών συμμετρίας που περιέχει κάθε ομάδα σημείου.

6.1 Εισαγωγή

Η μελέτη της εξάρτησης μιας σειράς ιδιοτήτων ενός μορίου από τη συμμετρία του διευκολύνεται σημαντικά αν σε κάθε διεργασία συμμετρίας της ομάδας σημείου του μορίου αντιστοιχηθεί μια μήτρα η οποία αποτελεί την *εκπροσώπηση της διεργασίας συμμετρίας*. Το σύνολο αυτών των μητρών αποτελεί μια μαθηματική *εκπροσώπηση της ομάδας σημείου*. Με την εισαγωγή των εκπροσωπήσεων η γεωμετρία των διεργασιών συμμετρίας αντικαθίσταται από την άλγεβρα των μητρών που τις εκπροσωπούν.

Η εφαρμογή της συμμετρίας στη μελέτη πολλών φυσικοχημικών ιδιοτήτων ενός μορίου συνίσταται στην εύρεση της επίδρασης των διεργασιών συμμετρίας του μορίου σε ιδιότητες όπως τα ατομικά τροχιακά, τα υβριδισμένα τροχιακά, τα μοριακά τροχιακά, οι δονητικές κινήσεις του μορίου κ.λ.π. Η χρήση των εκπροσωπήσεων επιτρέπει την ανάλυση, με απλές μαθηματικές πράξεις, της συμπεριφοράς των ιδιοτήτων αυτών υπό την επίδραση των διεργασιών συμμετρίας, η οποία διευκολύνει τον ορισμό των ιδιοτήτων με όρους κβαντομηχανικής.

Η θεωρία των εκπροσωπήσεων αποτελεί σημαντικό μέρος της θεωρίας των ομάδων. Στη συνέχεια, αφού αναλυθούν οι εκπροσωπήσεις μερικών αφηρημένων ομάδων, θα δοθεί ιδιαίτερη έμφαση στις εκπροσωπήσεις των ομάδων σημείου. Στο σημείο αυτό τονίζεται ότι μια ομάδα σημείου και η ισομορφική της αφηρημένη ομάδα, θα έχουν τις ίδιες εκπροσωπήσεις. Πριν όμως προχωρήσουμε στην ανάλυση των εκπροσωπήσεων θεωρείται σκόπιμο να παρατεθούν μερικά στοιχεία από την άλγεβρα των μητρών.

6.2 Άλγεβρα Μητρών

Ορισμός μήτρας και ορίζουσας

Μια *μήτρα* (matrix) A είναι μια ορθογωνική διάταξη m σειρών και n στηλών από σύμβολα ή αριθμούς που καλούνται *στοιχεία* της μήτρας. Οι διαστάσεις της μήτρας είναι $m \times n$. Τα στοιχεία της μήτρας συμβολίζονται a_{ij} και οι δείκτες i και j δηλώνουν τον αριθμό σειράς και στήλης αντιστοίχως στις οποίες βρίσκεται κάθε στοιχείο. Η μήτρα A και τα στοιχεία της, a_{ij} , γράφονται όπως παρακάτω.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1i} & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2i} & a_{2j} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{ii} & a_{ij} & \cdots & a_{in} \\ a_{j1} & a_{j2} & \cdots & a_{ji} & a_{jj} & \cdots & a_{jn} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mi} & a_{mj} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

Στις εφαρμογές της θεωρίας των ομάδων στη μοριακή συμμετρία χρησιμοποιούνται μόνο οι τετραγωνικές μήτρες διάστασης $m \times m$, στις οποίες ο αριθμός των στηλών είναι ίσος με τον αριθμό των γραμμών και καλείται *τάξη* της μήτρας. Σε ειδικές περιπτώσεις και συγκεκριμένα για τον ορισμό των διανυσμάτων χρησιμοποιούνται η *μήτρα σειρά* ή *διάνυσμα σειράς* και η *μήτρα στήλη* ή *διάνυσμα στήλης* με διαστάσεις $1 \times m$ και $m \times 1$ αντιστοίχως.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1i} & a_{1j} & \dots & a_{1m} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \dots \\ a_{i1} \\ a_{j1} \\ \dots \\ a_{m1} \end{pmatrix}$$

Ορίζουσα μήτρας

Η *ορίζουσα* (determinant) είναι μια συνάρτηση που συσχετίζει κάθε τετραγωνική μήτρα A με έναν αριθμό και συμβολίζεται ως $|A|$ ή $\det(A)$. Κάθε ορίζουσα $\det(A)$ συμβολίζει το άθροισμα συγκεκριμένων γινομένων των στοιχείων της μήτρας A και είναι ίση με έναν αριθμό. Έτσι, οι ορίζουσες των μητρών 1×1 , 2×2 και 3×3 είναι:

$$A = (a) \Rightarrow \det(A) = |a| = a, \quad A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \Rightarrow \det(A) = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc,$$

$$A = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} \Rightarrow \det(A) = \begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = a \begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix} - b \begin{vmatrix} d & f \\ g & i \end{vmatrix} + c \begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix}$$

Ίχνος τετραγωνικής μήτρας

Το *ίχνος* (trace) μια τετραγωνικής μήτρας A τάξης m ισούται με το άθροισμα των διαγώνιων στοιχείων της και συμβολίζεται ως $\text{trace}(A)$, δηλαδή:

$$\text{trace}(A) = \sum_i^m a_{ii}$$

Το ίχνος των μητρών που εκπροσωπούν στοιχεία ομάδων ή διεργασίες ομάδων σημείου καλείται και *χαρακτήρας* της μήτρας και συμβολίζεται ως $\chi(A)$.

Μήτρα μονάδα

Η *μήτρα μονάδα* είναι μια τετραγωνική μήτρα της οποίας τα διαγώνια στοιχεία είναι ίσα με τη μονάδα και τα μη διαγώνια ίσα με μηδέν, μπορεί να έχει οποιαδήποτε τάξη και συμβολίζεται ως E .

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad e_{ij} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}, \quad \delta_{ij}: \text{δέλτα του Kroenecker}$$

Η ορίζουσα της μήτρας ταυτότητας ισούται με την μονάδα, $\det(E)=1$, και το ίχνος της $\text{trace}(E)=m$, όπου m είναι η τάξη της.

Μήτρα μηδέν ή κενή μήτρα

Η *μήτρα μηδέν* ή *κενή μήτρα* είναι μια μήτρα (όχι απαραίτητα τετραγωνική) της οποίας όλα τα στοιχεία είναι ίσα με μηδέν, μπορεί να έχει οποιαδήποτε τάξη και συμβολίζεται ως 0 .

$$O = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad e_{ij} = 0, \forall i, j$$

Ισότητα μητρών

Δύο μήτρες είναι *ίσες* αν έχουν τις ίδιες διαστάσεις και όλα τα στοιχεία τους ίσα, δηλαδή $A = B \Leftrightarrow a_{ij} = b_{ij}, \forall i, j$. Προφανώς ίσες μήτρες έχουν ίσες ορίζουσες και ίχνη.

Διαγώνια μήτρα

Μια *διαγώνια μήτρα* είναι μια τετραγωνική μήτρα της οποίας μόνον τα μη διαγώνια στοιχεία είναι ίσα με μηδέν.

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad d_{ij} = x\delta_{ij} = \begin{cases} x & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases}, \quad \text{όπου } x : \text{οποιοδήποτε σύμβολο ή αριθμός}$$

Συμμετρική μήτρα

Μια τετραγωνική μήτρα είναι *συμμετρική* όταν κάθε σειρά m είναι ίση με τη στήλη m .

$$a_{ij} = a_{ji}, \forall i, j \quad \text{π.χ.} \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 6 \\ 5 & 2 & 3 \\ 6 & 3 & 0 \end{pmatrix}$$

Μεταθετική μήτρα

Η *μεταθετική* μήτρα μιας μήτρας A είναι αυτή που προκύπτει από την A αν μετατραπούν οι σειρές σε στήλες ή αντιστρόφως και συμβολίζεται ως \tilde{A} .

$$B = \tilde{A} \Leftrightarrow b_{ij} = a_{ji}, \forall i, j \quad \text{π.χ.} \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix} \Rightarrow B = \tilde{A} = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 9 \end{pmatrix}$$

Είναι προφανές ότι μια *συμμετρική μήτρα είναι ίση με τη μεταθετική της* και ότι $\det(\tilde{A}) = \det(A)$.

Άθροισμα και διαφορά μητρών

Το *άθροισμα* και η *διαφορά* ($A \pm B$) δύο μητρών A και B ορίζονται μόνον αν οι μήτρες έχουν τις ίδιες διαστάσεις και ισούνται με μια μήτρα ίδιων διαστάσεων, $C = A \pm B$. Κάθε στοιχείο της μήτρας C ισούται με το άθροισμα ή τη διαφορά των αντίστοιχων στοιχείων των μητρών A και B , δηλαδή $C = A \pm B \Leftrightarrow c_{ij} = a_{ji} \pm b_{ji}, \forall i, j$. Είναι προφανές ότι $A \pm 0 = A$ και $A - A = 0$. Για τα ίχνη του αθροίσματος ή της διαφοράς $A \pm B$, ισχύει: $\text{trace}(A \pm B) = \text{trace}(A) \pm \text{trace}(B)$.

Άμεσο άθροισμα μητρών

Το *άμεσο άθροισμα* $A \oplus B$ δύο μητρών A και B με διαστάσεις $m \times m$ και $n \times n$ αντιστοίχως είναι μια μήτρα διαστάσεων $(m+n) \times (m+n)$ που έχει τις μήτρες A και B ως δύο *τομείς* διατεταγμένους στη διαγώνιο της και όλα υπόλοιπα στοιχεία της ίσα με 0. Για παράδειγμα για $m=3$ και $n=2$ ισχύει:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \Rightarrow A \oplus B = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_{11} & b_{12} \\ 0 & 0 & 0 & b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}$$

Ο *πολλαπλασιασμός* δύο άμεσων αθροισμάτων με τις ίδιες διαστάσεις και διάταξη τομέων ισοδυναμεί με το άμεσο άθροισμα των μητρών που προκύπτουν από τον *πολλαπλασιασμό* των επιμέρους τομέων, δηλαδή:

$$(A \oplus B)(C \oplus D) = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AC & 0 \\ 0 & BD \end{pmatrix} = (AC) \oplus (BD)$$

Για το *ίχνος* του άμεσου αθροίσματος $A \oplus B$, ισχύει $\text{trace}(A \oplus B) = \text{trace}(A) + \text{trace}(B)$.

Πολλαπλασιασμός μήτρας επί αριθμό

Ο *πολλαπλασιασμός* μιας μήτρας A επί έναν αριθμό x συνίσταται στον *πολλαπλασιασμό* όλων των στοιχείων της επί τον αριθμό. Για παράδειγμα,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \Rightarrow xA = \begin{pmatrix} xa_{11} & xa_{12} & xa_{13} \\ xa_{21} & xa_{22} & xa_{23} \\ xa_{31} & xa_{32} & xa_{33} \end{pmatrix}$$

Σε ότι αφορά την ορίζουσα και το *ίχνος* του γινομένου μιας τετραγωνικής μήτρας A διάστασης $(m \times m)$ επί έναν αριθμό x ισχύει $\det(xA) = x^m \det(A)$ και $\text{trace}(xA) = x \text{trace}(A)$.

Γινόμενο μητρώων

Το γινόμενο δύο μητρώων A και B ορίζεται μόνον όταν οι διαστάσεις της πρώτης είναι $(m \times n)$ και της δεύτερης $(n \times p)$, δηλαδή αν ο αριθμός των στηλών της πρώτης είναι ίσος με τον αριθμό των σειρών της δεύτερης. Σε αυτήν την περίπτωση οι δύο μήτρες καλούνται *σύμφωνες*. Από τον πολλαπλασιασμό των A και B προκύπτει μια μήτρα $C=AB$ με διαστάσεις $(m \times p)$. Τα στοιχεία c_{ij} της μήτρας C είναι ίσα με το άθροισμα των γινομένων ένα προς ένα των στοιχείων της σειράς i της A και της στήλης j της B και υπολογίζονται από την παρακάτω σχέση.

$$C = AB \Leftrightarrow c_{ij} = \sum_k^n a_{ik} b_{kj}, \quad \forall i = 1, m \ \& \ \forall j = 1, p \quad \text{π.χ.} \quad \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet \\ \circ & \circ & \circ \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bullet & \circ \\ \circ & \bullet \\ \bullet & \circ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

Κατά τον πολλαπλασιασμό των μητρώων, εκτός ειδικών περιπτώσεων, δεν ισχύει η ιδιότητα της αντιμετάθεσης, δηλαδή $AB \neq BA$. Για παράδειγμα, ενώ το παραπάνω γινόμενο $C=AB$ μπορεί να οριστεί, το γινόμενο BA δεν ορίζεται καν λόγω ασυμφωνίας των διαστάσεων $(n \times p)(m \times n)$. Η αντιμεταθετική ιδιότητα δεν ισχύει πάντα και κατά τον πολλαπλασιασμό τετραγωνικών μητρώων. Η μήτρα μονάδα αντιμετατίθεται με κάθε μήτρα. Κατά τον πολλαπλασιασμό ισχύει η προσεταιριστική, $A(BC)=(AB)C$, και η επιμεριστική ιδιότητα, $A(B+C)=AB+AC$. Επίσης ισχύει $\det(AB)=\det(A)\det(B)$.

Ιδιαίτερες περιπτώσεις πολλαπλασιασμού που απαντώνται στη μοριακή συμμετρία είναι αυτές των μητρώων με τις ακόλουθες διαστάσεις: $(m \times m)(m \times m) \rightarrow (m \times m)$, $(1 \times m)(m \times m) \rightarrow (1 \times m)$, $(m \times m)(m \times 1) \rightarrow (m \times 1)$, $(m \times 1)(1 \times m) \rightarrow (m \times m)$ και $(1 \times m)(m \times 1) \rightarrow (1 \times 1)$.

Άμεσο γινόμενο μητρώων

Το άμεσο γινόμενο $A \otimes B$ δύο μητρώων A και B με διαστάσεις $m \times m$ και $n \times n$ αντιστοίχως είναι μια μήτρα διαστάσεων $(mn) \times (mn)$ τα στοιχεία της οποίας υπολογίζονται όπως παρακάτω.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \Rightarrow A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} & a_{12} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} & a_{13} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \\ a_{21} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} & a_{22} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} & a_{23} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \\ a_{31} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} & a_{32} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} & a_{33} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} & a_{13}b_{11} & a_{13}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} & a_{13}b_{21} & a_{13}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} & a_{23}b_{11} & a_{23}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} & a_{23}b_{21} & a_{23}b_{22} \\ a_{31}b_{11} & a_{31}b_{12} & a_{32}b_{11} & a_{32}b_{12} & a_{33}b_{11} & a_{33}b_{12} \\ a_{31}b_{21} & a_{31}b_{22} & a_{32}b_{21} & a_{32}b_{22} & a_{33}b_{21} & a_{33}b_{22} \end{pmatrix}$$

Για το ίχνος του άμεσου γινομένου $A \otimes B$ δύο μητρώων A και B ισχύει $\text{trace}(A \otimes B) = \text{trace}(A)\text{trace}(B)$.

Αντίστροφη μήτρα

Για κάθε τετραγωνική μήτρα A που έχει μη μηδενική ορίζουσα ($\det(A) \neq 0$) ορίζεται η αντίστροφός της με βάση την ακόλουθη εξίσωση:

$$AA^{-1} = A^{-1}A = E$$

Όταν $\det(A) = 0$ η μήτρα A καλείται *μοναδική*, ενώ αν $\det(A) \neq 0$ καλείται *μη μοναδική*.

Η αντίστροφός μιας τετραγωνικής μήτρας τάξης m υπολογίζεται όπως παρακάτω

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} A_{11} / \det(A) & A_{21} / \det(A) & \dots & A_{n1} / \det(A) \\ A_{12} / \det(A) & A_{22} / \det(A) & \dots & A_{n2} / \det(A) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{1n} / \det(A) & A_{2n} / \det(A) & \dots & A_{nn} / \det(A) \end{pmatrix}$$

όπου A_{ij} είναι ο *συνπαράγοντας* του στοιχείου a_{ij} , δηλαδή η ορίζουσα της τετραγωνικής μήτρας τάξης $m-1$ που προκύπτει αν από την μήτρα A αφαιρεθούν η σειρά i και η στήλη j , πολλαπλασιασμένη επί $(-1)^{i+j}$. Είναι προφανές

ότι για τις μη τετραγωνικές μήτρες δεν ορίζεται αντίστροφος, αφού δεν ορίζονται η μήτρα μονάδα και η ορίζουσα. Τέλος, η ορίζουσα της αντίστροφης μήτρας είναι $\det(A^{-1})=1/\det(A)$.

Διαίρεση μητρών

Η *διαίρεση* δύο τετραγωνικών μητρών A και B , εφόσον $\det(B) \neq 0$, ορίζεται ως ο πολλαπλασιασμός από δεξιά της A επί την αντίστροφο της B με βάση τις σχέσεις:

$$PB = A \Rightarrow PBB^{-1} = AB^{-1} \Rightarrow PE = AB^{-1} \Rightarrow P = AB^{-1}$$

Ορθογωνική μήτρα

Μια μήτρα A είναι *ορθογωνική* όταν η μεταθετική της ισούται με την αντίστροφό της, δηλαδή $\tilde{A} = A^{-1}$.

Μετασχηματισμός ομοιότητας και συζυγείς μήτρες

Αν για δύο μήτρες A και B υπάρχει μια μήτρα S τέτοια ώστε:

$$S^{-1}AS=B$$

οι μήτρες A και B σχετίζονται με έναν *μετασχηματισμό ομοιότητας* και καλούνται *συζυγείς* μήτρες. Οι ορίζουσες δύο συζυγών μητρών είναι ίσες. Συνεπώς, κάθε μετασχηματισμός ομοιότητας δεν αλλάζει την ορίζουσα μιας μήτρας, καθόσον:

$$\det(B)=\det(S^{-1}AS)=\det(S^{-1})\det(A)\det(S)=[1/\det(S)]\det(A)\det(S)=\det(A)$$

Επίσης, τα ίχνη δύο συζυγών μητρών είναι ίσα. Συνεπώς, κάθε μετασχηματισμός ομοιότητας δεν αλλάζει το ίχνος μιας μήτρας εκπροσώπησης, δηλαδή:

$$\text{trace}(B)=\text{trace}(S^{-1}AS)=\text{trace}(A).$$

6.3 Εκπροσωπήσεις Μαθηματικών Ομάδων με Μήτρες

Για κάθε μαθηματική ομάδα $G=\{E, A, B, C, \dots\}$ με τάξη h μπορεί να βρεθεί ένα σύνολο από h μήτρες διάστασης $m \times m$, κάθε μια από τις οποίες αντιστοιχεί σε ένα στοιχείο της ομάδας. Η μήτρα που αντιστοιχεί στο στοιχείο X της ομάδας καλείται *εκπροσώπηση του στοιχείου X* και συμβολίζεται ως $R^m(X)$. Το σύνολο αυτό των μητρών εκπροσώπησης αποτελούν μια μαθηματική ομάδα $\{R^m(E), R^m(A), R^m(B), R^m(C), \dots\}$ η οποία είναι ισόμορφη με την G , καλείται *εκπροσώπηση της ομάδας* και συμβολίζεται ως $R^m(G)$. Οι παραπάνω εκπροσωπήσεις μητρών των στοιχείων και της ομάδας συμβολίζονται ως $X \mapsto R^m(X)$ και $G \mapsto R^m(G)$ αντιστοίχως. Η διάσταση m των μητρών εκπροσώπησης που συνιστούν μια εκπροσώπηση μιας ομάδας καλείται *διάσταση της εκπροσώπησης*.

Μια εκπροσώπηση μητρών μιας ομάδας καλείται *πιστή εκπροσώπηση* όταν κάθε στοιχείο της ομάδας εκπροσωπείται από διαφορετική μήτρα και *μη πιστή εκπροσώπηση* όταν κάποια στοιχεία της ομάδας εκπροσωπούνται από την ίδια μήτρα.

Το ίχνος μιας μήτρας $R^m(X)$ που εκπροσωπεί ένα στοιχείο X μιας ομάδας καλείται *χαρακτήρας* της εκπροσώπησης ή του στοιχείου και συμβολίζεται ως $\chi(X)$. Όπως θα δούμε στη συνέχεια οι χαρακτήρες των εκπροσωπήσεων είναι εξαιρετικά χρήσιμοι διότι φέρουν όλες τις απαιτούμενες πληροφορίες των εκπροσωπήσεων που χρειάζονται στην μοριακή συμμετρία. Το σύνολο των χαρακτήρων των μητρών εκπροσώπησης $\{\chi(E), \chi(A), \chi(B), \chi(C), \dots\}$ των στοιχείων της ομάδας καλείται *εκπροσώπηση χαρακτήρων της ομάδας* και συμβολίζεται ως $\Gamma^m(G)$. Στη συνέχεια θα δοθούν μερικές εκπροσωπήσεις μητρών και χαρακτήρων για τις αφηρημένες ομάδες $Z_2 \times Z_2$ και Z_3 του Πίνακα 5.1.1β (παράγραφος 5.1.1).

$$\text{Εκπροσώπηση } Z_2 \times Z_2 \mapsto R^3(Z_2 \times Z_2)$$

Ας υποθέσουμε ότι το παρακάτω σύνολο R^3 των μητρών $R^3(X)$ διαστάσεων 3×3 , κάθε μια από τις οποίες εκπροσωπεί ένα από τα στοιχεία της αφηρημένης ομάδας $Z_2 \times Z_2$,

$$E \mapsto R^3(E) \quad A \mapsto R^3(A) \quad B \mapsto R^3(B) \quad C \mapsto R^3(C)$$

$$R^3(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R^3(A) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R^3(B) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R^3(C) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

αποτελεί μια εκπροσώπηση της ομάδας $Z_2 \times Z_2$. Το σύνολο μητρώων R^3 αποτελεί μαθηματική ομάδα καθώς πληροί όλες τις ιδιότητες των μαθηματικών ομάδων. Για παράδειγμα, εύκολα διαπιστώνεται ότι πολλαπλασιασμός οποιωνδήποτε δύο στοιχείων της ισούται με ένα άλλο στοιχείο της (κλειστότητα), υπάρχει το στοιχείο $R^3(E)$ για το οποίο ισχύει $R^3(E)R^3(X) = R^3(X)R^3(E) = R^3(X)$ (ταυτότητα) και το αντίστροφο κάθε στοιχείου της είναι επίσης στοιχείο της ομάδας: $R^3(E)^{-1} = R^3(E)$, $R^3(A)^{-1} = R^3(A)$, $R^3(B)^{-1} = R^3(B)$, $R^3(C)^{-1} = R^3(C)$ (ύπαρξη αντίστροφων στοιχείων).

Αν εκτελέσουμε τους πολλαπλασιασμούς των μητρώων, καταστρώσουμε τον πίνακα πολλαπλασιασμού της ομάδας R^3 και τον συγκρίνουμε με τον πίνακα πολλαπλασιασμού της ομάδας $Z_2 \times Z_2$ (Πίνακας 5.2.1a), όπως φαίνεται παρακάτω,

$Z_2 \times Z_2$	E	A	B	C	R^3	$R^3(E)$	$R^3(A)$	$R^3(B)$	$R^3(C)$
E	E	A	B	C	$R^3(E)$	$R^3(E)$	$R^3(A)$	$R^3(B)$	$R^3(C)$
A	A	E	C	B	$R^3(A)$	$R^3(A)$	$R^3(E)$	$R^3(C)$	$R^3(B)$
B	B	C	E	A	$R^3(B)$	$R^3(B)$	$R^3(C)$	$R^3(E)$	$R^3(A)$
C	C	B	A	E	$R^3(C)$	$R^3(C)$	$R^3(B)$	$R^3(A)$	$R^3(E)$

διαπιστώνουμε ότι οι δύο πίνακες πολλαπλασιασμού έχουν την ίδια μορφή. Για παράδειγμα όταν για την $Z_2 \times Z_2$ ισχύει $AB = BA = C$, για την R^3 ισχύει επίσης $R^3(A)R^3(B) = R^3(B)R^3(A) = R^3(C)$. Έτσι, οι ομάδες $Z_2 \times Z_2$ και R^3 είναι ισόμορφες και συνεπώς η R^3 αποτελεί πράγματι μια εκπροσώπηση της $Z_2 \times Z_2$, δηλαδή $Z_2 \times Z_2 \mapsto R^3(Z_2 \times Z_2)$.

Τέλος, η εκπροσώπηση χαρακτήρων της ομάδας καταστρώνεται από τους χαρακτήρες των μητρώων εκπροσώπησης και είναι:

$Z_2 \times Z_2$	E	A	B	C
$\Gamma^3(Z_2 \times Z_2)$	3	-1	1	1

Εκπροσώπηση $Z_2 \times Z_2 \mapsto R^2(Z_2 \times Z_2)$

Ας υποθέσουμε ότι το παρακάτω σύνολο R^2 των μητρώων $R^2(X)$ διαστάσεων 2×2 κάθε μια από τις οποίες εκπροσωπεί ένα από τα στοιχεία της αφηρημένης ομάδας $Z_2 \times Z_2$,

$$E \mapsto R^2(E) \quad A \mapsto R^2(A) \quad B \mapsto R^2(B) \quad C \mapsto R^2(C)$$

$$R^2(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R^2(A) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad R^2(B) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad R^2(C) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

αποτελεί μια εκπροσώπηση της ομάδας $Z_2 \times Z_2$. Το σύνολο μητρώων R^2 αποτελεί μαθηματική ομάδα καθώς πληροί όλες τις ιδιότητες των μαθηματικών ομάδων. Για παράδειγμα, εύκολα διαπιστώνεται ότι πολλαπλασιασμός οποιωνδήποτε δύο στοιχείων της ισούται με ένα άλλο στοιχείο της (κλειστότητα), υπάρχει το στοιχείο $R^2(E)$ για το οποίο ισχύει $R^2(E)R^2(X) = R^2(X)R^2(E) = R^2(X)$ (ταυτότητα) και το αντίστροφο κάθε στοιχείου της είναι επίσης στοιχείο της ομάδας ($R^2(E)^{-1} = R^2(E)$, $R^2(A)^{-1} = R^2(A)$, $R^2(B)^{-1} = R^2(B)$, $R^2(C)^{-1} = R^2(C)$) (ύπαρξη αντίστροφων στοιχείων).

Αν εκτελέσουμε τους πολλαπλασιασμούς των μητρώων, καταστρώσουμε τον πίνακα πολλαπλασιασμού της ομάδας R^2 και τον συγκρίνουμε με τον πίνακα πολλαπλασιασμού της ομάδας $Z_2 \times Z_2$ (Πίνακας 5.2.1a), όπως φαίνεται παρακάτω,

$Z_2 \times Z_2$	E	A	B	C	R^2	$R^2(E)$	$R^2(A)$	$R^2(B)$	$R^2(C)$
E	E	A	B	C	$R^2(E)$	$R^2(E)$	$R^2(A)$	$R^2(B)$	$R^2(C)$
A	A	E	C	B	$R^2(A)$	$R^2(A)$	$R^2(E)$	$R^2(C)$	$R^2(B)$
B	B	C	E	A	$R^2(B)$	$R^2(B)$	$R^2(C)$	$R^2(E)$	$R^2(A)$
C	C	B	A	E	$R^2(C)$	$R^2(C)$	$R^2(B)$	$R^2(A)$	$R^2(E)$

διαπιστώνουμε ότι πράγματι οι δύο πίνακες πολλαπλασιασμού έχουν την ίδια μορφή, για παράδειγμα όταν για την $Z_2 \times Z_2$ ισχύει $AB=BA=C$, για την R^2 ισχύει επίσης $R^2(A)R^2(B)=R^2(B)R^2(A)=R^2(C)$. Έτσι, οι ομάδες $Z_2 \times Z_2$ και R^2 είναι ισόμορφες και συνεπώς η R^2 αποτελεί μια εκπροσώπηση της $Z_2 \times Z_2$, δηλαδή $Z_2 \times Z_2 \mapsto R^2(Z_2 \times Z_2)$.

Τέλος, η εκπροσώπηση χαρακτήρων της ομάδας καταστρώνεται από τους χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης και είναι:

$Z_2 \times Z_2$	E	A	B	C
$\Gamma^2(Z_2 \times Z_2)$	2	0	-2	0

Εκπροσώπηση $Z_3 \mapsto R^3(Z_3)$

Ας υποθέσουμε ότι το παρακάτω σύνολο R^3 των μητρών $R^3(X)$ διαστάσεων 3×3 κάθε μια από τις οποίες εκπροσωπεί ένα από τα στοιχεία της αφηρημένης ομάδας Z_3 ,

$$E \mapsto R^3(E) \quad A \mapsto R^3(A) \quad B \mapsto R^3(B)$$

$$R^3(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R^3(A) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad R^3(B) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

αποτελεί μια εκπροσώπηση της ομάδας Z_3 . Το σύνολο μητρών R^3 αποτελεί μαθηματική ομάδα καθώς πληροί όλες τις ιδιότητες των μαθηματικών ομάδων. Για παράδειγμα, εύκολα διαπιστώνεται ότι ο πολλαπλασιασμός οποιωνδήποτε δύο στοιχείων της ισούται με ένα άλλο στοιχείο της (κλειστότητα), υπάρχει το στοιχείο $R^3(E)$ για το οποίο ισχύει $R^3(E)R^3(X)=R^3(X)R^3(E)=R^3(X)$ (ταυτότητα) και το αντίστροφο κάθε στοιχείου της είναι επίσης στοιχείο της ομάδας: $R^3(E)^{-1}=R^3(E)$, $R^3(A)^{-1}=R^3(B)$, $R^3(B)^{-1}=R^3(A)$ (ύπαρξη αντίστροφων στοιχείων).

Αν εκτελέσουμε τους πολλαπλασιασμούς των μητρών, καταστρώσουμε τον πίνακα πολλαπλασιασμού της ομάδας R^3 και τον συγκρίνουμε με τον πίνακα πολλαπλασιασμού της ομάδας Z_3 (Πίνακας 5.2.1a), όπως φαίνεται παρακάτω,

Z_3	E	A	B	R^3	$R^3(E)$	$R^3(A)$	$R^3(B)$
E	E	A	B	$R^3(E)$	$R^3(E)$	$R^3(A)$	$R^3(B)$
A	A	B	E	$R^3(A)$	$R^3(A)$	$R^3(B)$	$R^3(E)$
B	B	E	A	$R^3(B)$	$R^3(B)$	$R^3(E)$	$R^3(A)$

διαπιστώνουμε ότι οι δύο πίνακες πολλαπλασιασμού έχουν την ίδια μορφή, για παράδειγμα όταν για την Z_3 ισχύει $AB=BA=E$, για την R^3 ισχύει επίσης $R^3(A)R^3(B)=R^3(B)R^3(A)=R^3(E)$. Έτσι, οι ομάδες Z_3 και R^3 είναι ισόμορφες και συνεπώς η R^3 αποτελεί πράγματι μια εκπροσώπηση της Z_3 , δηλαδή $Z_3 \mapsto R^3(Z_3)$.

Τέλος, η εκπροσώπηση χαρακτήρων της ομάδας καταστρώνεται από τους χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης και είναι:

Z_3	E	A	B
$\Gamma^3(Z_3)$	3	0	0

6.4 Εκπροσωπήσεις Ομάδων Σημείου με Μήτρες

Όπως στις μαθηματικές ομάδες έτσι και για οποιαδήποτε ομάδα σημείου, $O\Sigma$, με τάξη h μπορεί να βρεθεί μια ισόμορφη ομάδα $R^m(O\Sigma)$ με στοιχεία h μήτρες τάξης m , $R^m(X)$, κάθε μια από τις οποίες εκπροσωπεί μια διεργασία συμμετρίας (X) της ομάδας και καλείται *εκπροσώπηση της διεργασίας συμμετρίας* X , $X \mapsto R^m(X)$. Η ομάδα $R^m(O\Sigma)$ που αποτελείται από το σύνολο των μητρών, $R^m(X)$, αποτελεί μια *εκπροσώπηση της ομάδας σημείου*, $O\Sigma \mapsto R^m(O\Sigma)$.

Μια εκπροσώπηση μητρών μιας ομάδας σημείου καλείται *πιστή εκπροσώπηση* όταν κάθε διεργασία της ομάδας σημείου εκπροσωπείται από διαφορετική μήτρα και *μη πιστές εκπροσωπήσεις* όταν κάποιες διεργασίες της ομάδας σημείου εκπροσωπούνται από την ίδια μήτρα.

Η εκπροσώπηση των ομάδων σημείου με μήτρες είναι σημαντική επειδή διευκολύνει τη διερεύνηση της επίδρασης των διεργασιών συμμετρίας μιας ομάδας σημείου στις διάφορες ιδιότητες των μορίων που ανήκουν σε αυτή, καθώς η γεωμετρία των διεργασιών συμμετρίας όπως και οι συνδυασμοί, τα αντίστροφα, οι δυνάμεις των διεργασιών κ.α., ανάγονται πλέον σε αλγεβρικές πράξεις στα πλαίσια της άλγεβρας των μητρώων.

Για κάθε διεργασία συμμετρίας και συνεπώς για κάθε ομάδα σημείου είναι δυνατόν να δομηθεί ένας μεγάλος αριθμός εκπροσωπήσεων, οι οποίες διαφέρουν τόσο στις διαστάσεις των μητρώων, m , όσο και στη μορφή των μητρώων. Η μεθοδολογία εύρεσης των επιμέρους μητρώων *εκπροσώπησης* $R^m(\mathbf{X})$ των διεργασιών συμμετρίας μιας ομάδας σημείου $\mathbf{O\Sigma}$ συνίσταται στη μελέτη της επίδρασης κάθε διεργασίας συμμετρίας σε μια *βάση* και η έκφραση του αποτελέσματος της επίδρασης αυτής με μια *μήτρα μετασχηματισμού**. Το σύνολο των μητρώων μετασχηματισμού που αντιστοιχούν σε όλες τις διεργασίες συμμετρίας θα αποτελεί και την εκπροσώπηση της ομάδας σημείου $R^m(\mathbf{O\Sigma})$. Οι βάσεις που χρησιμοποιούνται για την εύρεση των εκπροσωπήσεων των ομάδων σημείου, ποικίλουν ως προς το είδος, τη διάσταση και τη μορφή τους. Για κάθε βάση που χρησιμοποιείται για τη δόμηση των μητρώων θα προκύπτει και μια νέα, διαφορετική εκπροσώπηση της ομάδας σημείου.

Στη συνέχεια θα αναλυθεί η μεθοδολογία εύρεσης εκπροσωπήσεων με τα ακόλουθα τέσσερα είδη βάσεων.

1. Δόμηση $[x, y, z]$ του σημείου και η τάξη των μητρώων μετασχηματισμού είναι ίση με 3.
2. Δόμηση μητρώων εκπροσώπησης με βάση τις μήτρες μετασχηματισμού που εκφράζουν το αποτέλεσμα της επίδρασης των διεργασιών συμμετρίας στις θέσεις ενός συνόλου διανυσμάτων τοποθετημένων σε συγκεκριμένες θέσεις του μορίου και συνιστούν ένα *διανυσματικό χώρο*. Στην περίπτωση αυτή ως βάση νοείται το διάνυσμα (μήτρα) στήλη που αποτελείται από τα διανύσματα του διανυσματικού χώρου και η τάξη των μητρώων μετασχηματισμού ισούται με το πλήθος των διανυσμάτων της βάσης.
3. Δόμηση μητρώων εκπροσώπησης με βάση τις μήτρες μετασχηματισμού που εκφράζουν το αποτέλεσμα της επίδρασης των διεργασιών συμμετρίας σε ένα σύνολο συναρτήσεων οι οποίες συνιστούν ένα *συναρτησιακό χώρο*. Στην περίπτωση αυτή ως βάση νοείται το διάνυσμα (μήτρα) στήλη που αποτελείται από τις συναρτήσεις του συναρτησιακού χώρου και η τάξη των μητρώων μετασχηματισμού ισούται με το πλήθος των συναρτήσεων της βάσης.
4. Δόμηση μητρώων εκπροσώπησης με βάση τις μήτρες μετασχηματισμού που εκφράζουν τις μεταθέσεις όλων ή μέρους των ατόμων του μορίου σε ισοδύναμες θέσεις ως αποτέλεσμα της επίδρασης των διεργασιών συμμετρίας. Στην περίπτωση αυτή η βάση αποτελείται από τα σύμβολα των ατόμων του μορίου στα οποία προστίθενται δείκτες που διαφοροποιούν τις ισοδύναμες θέσεις ίδιων ατόμων και η τάξη των μητρώων μετασχηματισμού ισούται με το πλήθος των ατόμων της βάσης.

Τέλος, τονίζεται ότι για τη δόμηση εκπροσωπήσεων πέραν των παραπάνω μπορούν να χρησιμοποιηθούν και άλλου τύπου βάσεις που δεν κρίνεται σκόπιμο να περιγραφούν εδώ.

* Ας υποθέσουμε ότι μια διεργασία \mathbf{X} , όχι απαραίτητα διεργασία συμμετρίας, επιδρά σε τρία στοιχεία (a, b, c) και τα μετασχηματίζει σε τρία νέα στοιχεία (a', b', c') τα οποία είναι: $a'=a$, $b'=c$ και $c'=b$. Αν τα στοιχεία αυτά γραφούν με μορφή μητρώων 3×1 (διανυσμάτων στήλης) ο μετασχηματισμός αυτός μπορεί να εκφραστεί με την παρακάτω εξίσωση μητρώων:

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \\ c' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} a' \\ b' \\ c' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ c \\ b \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} a' = a \\ b' = c \\ c' = b \end{cases}$$

Η μήτρα 3×3 αποτελεί τη *μήτρα μετασχηματισμού* των τριών στοιχείων (a, b, c) , τα οποία αποτελούν τη *βάση* με την οποία δομείται η συγκεκριμένη μήτρα μετασχηματισμού (εκπροσώπηση). Είναι προφανές ότι το *πλήθος των στοιχείων της βάσης καθορίζει και τη διάσταση της μήτρας μετασχηματισμού*.

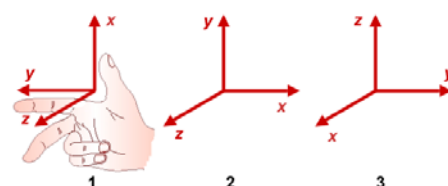
6.4.1 Ορισμός του Καρτεσιανού Συστήματος Συντεταγμένων και Προσανατολισμός Μορίων

Κατά τη δόμηση εκπροσωπήσεων των ομάδων σημείου είναι απαραίτητο να καθορισθεί το σύστημα συντεταγμένων και η τοποθέτηση σε αυτό ενός μορίου και των στοιχείων συμμετρίας της ομάδας σημείου στην οποία ανήκει.

Η κατεύθυνση των αξόνων του ορθογωνικού καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων καθορίζεται από τον *κανόνα του δεξιού χεριού*. Σύμφωνα με αυτόν η θετική κατεύθυνση των αξόνων x , y και z ορίζεται από τον αντίχειρα, το δείκτη και τον μέσο δάκτυλο του δεξιού χεριού όταν αυτά εκτείνονται ώστε να είναι κάθετα μεταξύ τους όπως φαίνεται στο *Σχήμα 6.4.1a-1*.

Το καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων πολλές φορές μπορεί να τοποθετηθεί στο χώρο με διαφορετικό προσανατολισμό από αυτόν του *σχήματος 6.4.1a-1*. Για παράδειγμα το σύστημα μπορεί να περιστραφεί περί έναν άξονα (π.χ. περί τον z όπως στο *Σχήμα 6.4.1a-2*) ή ο άξονας z να είναι έχει άλλη κατεύθυνση (όπως στο *Σχήμα 6.4.1a-3*). Σε κάθε περίπτωση όμως η σχετική φορά των αξόνων πρέπει να υπακούει στον παραπάνω κανόνα του δεξιού χεριού.

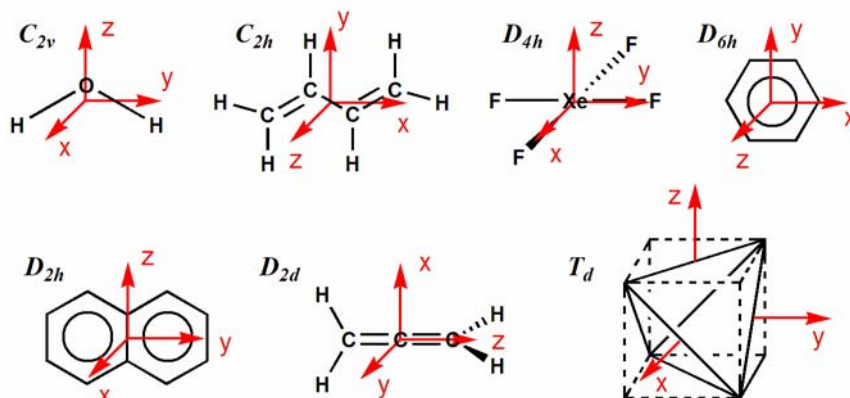
Η τοποθέτηση των μορίων στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων εξαρτάται από την ομάδα σημείου στην οποίαν ανήκει. Προς τούτο έχουν καθιερωθεί οι παρακάτω κανόνες.



Σχήμα 6.4.1a Κανόνας του δεξιού χεριού και σύμφωνη με αυτόν παράσταση καρτεσιανών συστημάτων.

1. Η αρχή του συστήματος συντεταγμένων ταυτίζεται με το κέντρο μάζας του μορίου.
2. Ο άξονας z ταυτίζεται με τον άξονα περιστροφής μεγαλύτερης τάξης (κύριο άξονα) C_n . Αν υπάρχουν περισσότεροι του ενός άξονες C_n (π.χ. D_{2h}), ο άξονας z ταυτίζεται με αυτόν που διέρχεται από περισσότερα άτομα. Στα μόρια όπου εκτός από άξονες C_n υπάρχει και άξονας στροφοκατοπτρισμού S_n (π.χ. D_{2d}) ο άξονας z ταυτίζεται με τον S_n . Εξαιρέση των παραπάνω γίνεται στα τετραεδρικά μόρια όπου οι άξονες x , y και z ταυτίζονται με τους τρεις άξονες C_2 ή S_4 .
3. Στα επίπεδα μόρια αν ο άξονας z τοποθετηθεί (όπως ορίζει ο 2^{ος} κανόνας) και είναι κάθετος στο μοριακό επίπεδο, ο άξονας x τοποθετείται επί του επιπέδου του μορίου με τρόπο ώστε να διέρχεται από το μέγιστο πλήθος ατόμων. Στην περίπτωση όμως που ο κύριος άξονας και συνεπώς και ο άξονας z κείται επί του επιπέδου του μορίου (π.χ. H_2O , C_{2v}) ο άξονας x τοποθετείται κάθετα στο επίπεδο.
4. Στα μη επίπεδα μόρια μετά τον ορισμό του άξονα z (όπως ορίζει ο 2^{ος} κανόνας), ο άξονας x τοποθετείται έτσι ώστε το επίπεδο xz να διέρχεται από όσο το δυνατόν περισσότερα άτομα. Αν αυτό δεν είναι δυνατόν η τοποθέτηση του επιπέδου δεν έχει ιδιαίτερη σημασία.

Στο *Σχήμα 6.4.1β* δίνονται μερικά παραδείγματα τοποθέτησης του καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων σε διάφορα μόρια με βάση την ομάδα σημείου τους και τους παραπάνω κανόνες.



Σχήμα 6.4.1β Παραδείγματα τοποθέτησης του καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων σε διάφορα μόρια.

Στο σημείο αυτό πρέπει να διευκρινιστεί ότι οι παραπάνω τέσσερις κανόνες είναι περισσότερο συμβάσεις παρά κανόνες με την αυστηρή έννοια του όρου. Σε πολλά βιβλία οι συγγραφείς ακολουθούν διαφορετική λογική τοποθέτησης των αξόνων. Αυτό, παρόλο που οδηγεί σε διαφοροποιήσεις στις μήτρες μετασχηματισμού και στα άλλα στοιχεία εφαρμογής της θεωρίας των ομάδων στη μοριακή συμμετρία, σε καμία περίπτωση δεν οδηγεί σε διαφορετικά συμπεράσματα ως προς τη συμμετρική συμπεριφορά των μορίων και τις συνέπειές της στις φυσικοχημικές του ιδιότητες. Σε κάθε περίπτωση όμως όταν εφαρμόζονται οι μέθοδοι που ακολουθούν πρέπει κατ' αρχή να δηλώνεται το καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων που χρησιμοποιείται και η τοποθέτηση του μορίου σε αυτό.

6.4.2 Εκπροσώπηση Ομάδων Σημείου με Βάση Διάνυσμα Θέσης

Πριν προχωρήσουμε στη δόμηση εκπροσωπήσεων συγκεκριμένων ομάδων σημείου με βάση διάνυσμα θέσης, είναι χρήσιμο να δομήσουμε τις μήτρες μετασχηματισμού των καρτεσιανών συντεταγμένων $[x, y, z]$ ενός σημείου του χώρου που αντιστοιχούν στα πέντε είδη διεργασιών συμμετρίας.

Μήτρα μετασχηματισμού ταυτότητας, E .

Η επίδραση της διεργασίας της ταυτότητας είναι προφανές ότι δε μεταβάλλει τις συντεταγμένες ενός σημείου του χώρου και έτσι:

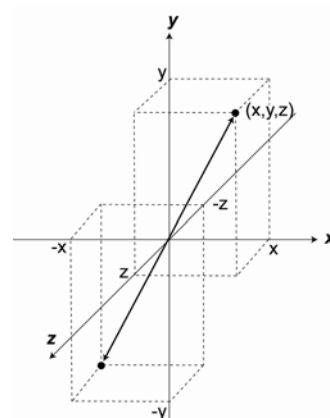
$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \mathbf{E} \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Συνεπώς η ταυτότητα εκπροσωπείται από τη μήτρα μονάδα διαστάσεων 3×3 .

Μήτρα μετασχηματισμού αναστροφής, i .

Η επίδραση της διεργασίας της αναστροφής ως προς το κέντρο των καρτεσιανών αξόνων όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.4.2α μετατοπίζει ένα σημείο του χώρου με συντεταγμένες $[x, y, z]$ σε ένα άλλο σημείο με συντεταγμένες $[-x, -y, -z]$. Συνεπώς η διεργασία αναστροφής θα εκπροσωπείται από την παρακάτω μήτρα:

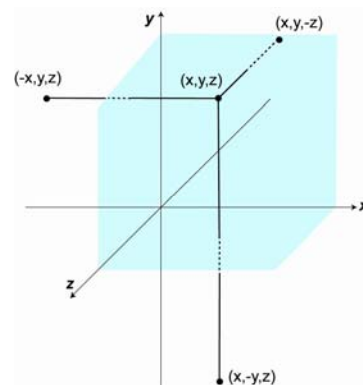
$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \mathbf{i} \mapsto \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$



Σχήμα 6.4.2α Αναστροφή σημείου ως προς το κέντρο των καρτεσιανών αξόνων

Μήτρες μετασχηματισμού διεργασιών κατοπτρισμού $\sigma(xz)$, $\sigma(yz)$, $\sigma(xy)$.

Η επίδραση της διεργασίας του κατοπτρισμού ενός σημείου ως προς ένα από τα επίπεδα που ορίζονται από τους καρτεσιανούς άξονες όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.4.2β, αλλάζει το πρόσημο της κάθετης στο επίπεδο αυτό συντεταγμένης του σημείου. Συνεπώς οι τρεις δυνατοί κατοπτρισμοί θα εκπροσωπούνται από τις παρακάτω μήτρες:



Σχήμα 6.4.2β Κατοπτρισμοί σημείου ως προς τα επίπεδα των καρτεσιανών αξόνων

$$\sigma(xz): \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x \\ -y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \sigma(xz) \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

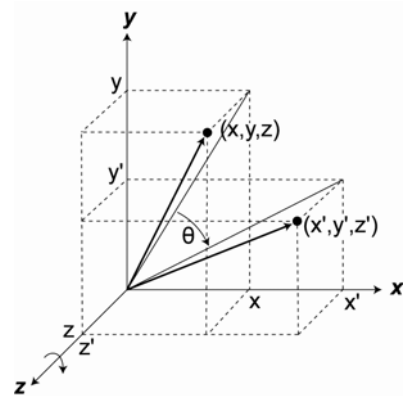
$$\sigma(yz): \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} -x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \sigma(yz) \mapsto \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma(xy): \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \sigma(xy) \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Μήτρες μετασχηματισμού διεργασιών περιστροφής $C_n(x)$, $C_n(y)$, $C_n(z)$.

Η επίδραση της διεργασίας της περιστροφής περί τον άξονα $C_n(z)$ που ταυτίζεται με τον καρτεσιανό άξονα z όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.4.2γ, δε μεταβάλλει τη συντεταγμένη z αλλά μόνον τις τιμές των συντεταγμένων x και y που υπολογίζονται εύκολα τριγωνομετρικά. Έτσι η μήτρα που εκπροσωπεί την περιστροφή $C_n(z)$ κατά γωνία $\theta=2\pi/n$ θα έχει την παρακάτω μορφή.

$$C_n(z): \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \cos\theta + y \sin\theta \\ -x \sin\theta + y \cos\theta \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\ \Leftrightarrow C_n(z) \mapsto \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



Σχήμα 6.4.2γ Περιστροφή σημείου ως προς τον άξονα των x κατά γωνία θ

Με την ίδια λογική οι μήτρες που εκπροσωπούν τις διεργασίες $C_n(x)$ και $C_n(y)$ θα είναι οι παρακάτω.

$$C_n(x): \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \cos\theta + z \sin\theta \\ -y \sin\theta + z \cos\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow C_n(x) \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \\ C_n(y): \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \cos\theta + z \sin\theta \\ y \\ -x \sin\theta + z \cos\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow C_n(y) \mapsto \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}$$

Μήτρες μετασχηματισμού διεργασιών στροφοκατοπτρισμού $S_n(x)$, $S_n(y)$, $S_n(z)$.

Η επίδραση της διεργασίας του στροφοκατοπτρισμού ως προς τον άξονα $S_n(z)$, που ταυτίζεται με τον καρτεσιανό άξονα z , εφόσον εμπεριέχει περιστροφή ως προς τον άξονα z , μεταβάλλει τις τιμές των συντεταγμένων x και y κατά τρόπο ανάλογο της περιστροφής $C_n(z)$. Αλλάζει επίσης το πρόσημο της συντεταγμένης z καθόσον η διεργασία στροφοκατοπτρισμού εμπεριέχει και κατοπτρισμό ως προς το επίπεδο $\sigma(xy)$. Ανάλογα ισχύουν και για τις διεργασίες στροφοκατοπτρισμού $S_n(x)$ και $S_n(y)$. Έτσι οι μήτρες που εκπροσωπούν τους τρεις στροφοκατοπτρισμούς είναι οι παρακάτω ($\theta=2\pi/n$).

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_n(z): \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x \sigma \nu \theta + y \eta \mu \theta \\ -x \eta \mu \theta + y \sigma \nu \theta \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma \nu \theta & \eta \mu \theta & 0 \\ -\eta \mu \theta & \sigma \nu \theta & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \mathbf{S}_n(z) \mapsto \begin{pmatrix} \sigma \nu \theta & \eta \mu \theta & 0 \\ -\eta \mu \theta & \sigma \nu \theta & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{S}_n(x): \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -x \\ y \sigma \nu \theta + z \eta \mu \theta \\ -y \eta \mu \theta + z \sigma \nu \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma \nu \theta & \eta \mu \theta \\ 0 & -\eta \mu \theta & \sigma \nu \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \mathbf{S}_n(x) \mapsto \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma \nu \theta & \eta \mu \theta \\ 0 & -\eta \mu \theta & \sigma \nu \theta \end{pmatrix} \\ \mathbf{S}_n(y): \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x \sigma \nu \theta + z \eta \mu \theta \\ -y \\ -x \eta \mu \theta + z \sigma \nu \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma \nu \theta & 0 & \eta \mu \theta \\ 0 & -1 & 0 \\ -\eta \mu \theta & 0 & \sigma \nu \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \mathbf{S}_n(y) \mapsto \begin{pmatrix} \sigma \nu \theta & 0 & \eta \mu \theta \\ 0 & -1 & 0 \\ -\eta \mu \theta & 0 & \sigma \nu \theta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Στην ίδια μήτρα εκπροσώπησης της διεργασίας $\mathbf{S}_n(z)$ καταλήγει κανείς αν λάβει υπόψιν του ότι ο στροφοκατοπτρισμός αποτελεί συνδυασμό της περιστροφής $\mathbf{C}_n(z)$ και του κατοπτρισμού $\sigma(xy)$, δηλαδή $\mathbf{S}_n(z) = \sigma(xy) \mathbf{C}_n(z)$. Έτσι η μήτρα μετασχηματισμού που εκπροσωπεί τη διεργασία του στροφοκατοπτρισμού θα είναι το γινόμενο των μητρών μετασχηματισμού της περιστροφής $\mathbf{C}_n(z)$ και του κατοπτρισμού $\sigma(xy)$, δηλαδή:

$$\sigma(xy) \mathbf{C}_n(z) \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma \nu \theta & \eta \mu \theta & 0 \\ -\eta \mu \theta & \sigma \nu \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma \nu \theta & \eta \mu \theta & 0 \\ -\eta \mu \theta & \sigma \nu \theta & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{S}_n(z) \mapsto \begin{pmatrix} \sigma \nu \theta & \eta \mu \theta & 0 \\ -\eta \mu \theta & \sigma \nu \theta & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Όλες οι παραπάνω μήτρες μετασχηματισμού είναι *ορθογωνικές*. Αυτό σημαίνει ότι η *αντίστροφη* τους είναι η *μεταθετική* τους μήτρα, δηλαδή μια μήτρα στην οποία έχουν αντιμετατεθεί σειρές και στήλες. Η ιδιότητα αυτή διευκολύνει σημαντικά την εύρεση των μητρών μετασχηματισμού των αντιστρόφων, \mathbf{X}^{-1} , των κατάλληλων και ακατάλληλων διεργασιών περιστροφής. Έτσι, για παράδειγμα για τους άξονες $\mathbf{C}_3(z)$ και $\mathbf{S}_3(z)$ θα ισχύει ($\theta=2\pi/3$):

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_3(z) \mapsto \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_3(z)^{-1} \mapsto \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{S}_3(z) \mapsto \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_3(z)^{-1} \mapsto \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Τέλος, σε ότι αφορά στην ταυτότητα, την αναστροφή και τον κατοπτρισμό αξίζει να αναφερθούν οι παρακάτω ισοδυναμίες.

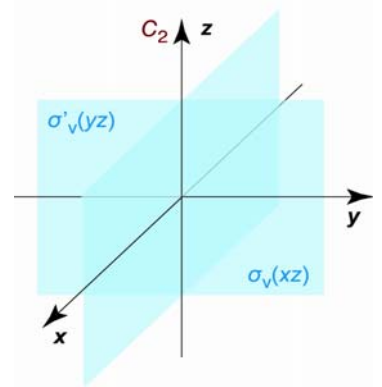
$$\begin{aligned} \mathbf{E} = \mathbf{C}_1(z) \Rightarrow \mathbf{E} \mapsto \begin{pmatrix} \sigma \nu(2\pi) & \eta \mu(2\pi) & 0 \\ -\eta \mu(2\pi) & \sigma \nu(2\pi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \sigma(xy) = \mathbf{S}_1(z) \Rightarrow \sigma(xy) \mapsto \begin{pmatrix} \sigma \nu(2\pi) & \eta \mu(2\pi) & 0 \\ -\eta \mu(2\pi) & \sigma \nu(2\pi) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{i} = \mathbf{S}_2(z) \Rightarrow \mathbf{i} \mapsto \begin{pmatrix} \sigma \nu(\pi) & \eta \mu(\pi) & 0 \\ -\eta \mu(\pi) & \sigma \nu(\pi) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Εκπροσώπηση $C_{2v} \mapsto R^3(C_{2v})$ με βάση διάνυσμα θέσης

Στο Σχήμα 6.4.2δ δίνονται τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας C_{2v} : E , C_2 , $\sigma_v(xz)$, $\sigma_v(yz)$. Με βάση τις παραπάνω γενικές μήτρες μετασχηματισμού και δεδομένου ότι για την περιστροφή C_2 είναι $\theta=\pi$ εύκολα προκύπτουν οι παρακάτω εκπροσωπήσεις.

$$E \mapsto R^3(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C_2 \mapsto R^3(C_2(z)) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_v(xz) \mapsto R^3(\sigma_v(xz)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_v(yz) \mapsto R^3(\sigma_v(yz)) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



Σχήμα 6.4.2δ Στοιχεία συμμετρίας της ομάδας C_{2v}

Η εκπροσώπηση της ομάδας σημείου $C_{2v} \mapsto R^3(C_{2v})$ που προέκυψε είναι όμοια με την εκπροσώπηση $Z_2 \times Z_2 \mapsto R^3(Z_2 \times Z_2)$ που αναλύθηκε στην παράγραφο 6.3. Αυτό είναι απολύτως φυσιολογικό αφού, όπως είδαμε στο κεφάλαιο 5, η αφηρημένη ομάδα $Z_2 \times Z_2$ και η ομάδα σημείου C_{2v} είναι ισόμορφες με αντιστοιχία στοιχείων και διεργασιών $E: E, A: C_2, B: \sigma_v(xz)$ και $C: \sigma_v(yz)$ και συνεπώς αναμένεται να έχουν και τις ίδιες εκπροσωπήσεις.

Τέλος, η εκπροσώπηση της ομάδας σημείου (C_{2v}) με βάση τους χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
$\Gamma^3(C_{2v})$	3	-1	1	1

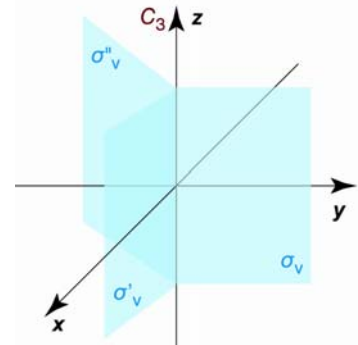
Προφανώς η εκπροσώπηση της ομάδας σημείου C_{2v} με βάση τους χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι ίδια με την εκπροσώπηση της ισομορφικής αφηρημένης ομάδας $Z_2 \times Z_2$.

Εκπροσώπηση $C_{3v} \mapsto R^3(C_{3v})$ με βάση διάνυσμα θέσης

Στο Σχήμα 6.4.2ε δίνονται τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας σημείου C_{3v} : E , C_3 , C_3^2 , σ_v , σ'_v , σ''_v όπου ως σ_v λαμβάνεται το επίπεδο yz . Η δόμηση των μητρών εκπροσώπησης των διεργασιών συμμετρίας της ομάδας προκύπτουν από τις παραπάνω γενικές μήτρες μετασχηματισμού των αξόνων και του επιπέδου κατοπτρισμού $\sigma(yz)$. Για τις διεργασίες περιστροφής, δεδομένου ότι για την περιστροφή C_3 είναι $\theta=2\pi/3$, ενώ για την C_3^2 είναι $\theta=4\pi/3$, εύκολα προκύπτουν οι παρακάτω εκπροσωπήσεις.

$$E \mapsto R^3(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C_3 \mapsto R^3(C_3) = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$C_3^2 \mapsto R^3(C_3^2) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_v \mapsto R^3(\sigma_v) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



Σχήμα 6.4.2ε Στοιχεία συμμετρίας της ομάδας C_{3v}

Για τη δόμηση των εκπροσωπήσεων των διεργασιών κατοπτρισμού σ'_v και σ''_v της ομάδας σημείου C_{3v} δεν είναι δυνατό να χρησιμοποιηθούν όπως προηγούμενα, οι γενικές μήτρες μετασχηματισμού των επιπέδων κατοπτρισμού $\sigma(xz)$, $\sigma(yz)$ και $\sigma(xy)$ καθόσον όπως φαίνεται και στο Σχήμα 6.4.2ε αυτά δεν ταυτίζονται με κανένα από τα επίπεδα αυτά. Στην περίπτωση αυτή η δόμηση των μητρών προκύπτει είτε με βάση τριγωνομετρικές σχέσεις είτε ακόμη πιο απλά από την ανάλυση της διεργασίας σε συνδυασμούς διεργασιών ($\sigma'_v = C_3 \sigma_v$ και $\sigma''_v = C_3^2 \sigma_v$) καθώς η εκπροσώπηση

μιας διεργασίας που ισοδυναμεί με το συνδυασμό δύο άλλων ισούται με το γινόμενο των εκπροσωπήσεων των διεργασιών του συνδυασμού. Έτσι οι εκπροσωπήσεις των σ' , και σ'' , θα είναι:

$$\begin{aligned} \sigma'_v = C_3 \sigma_v &\Rightarrow R^3(\sigma'_v) = R^3(C_3)R^3(\sigma_v) \Rightarrow \\ \sigma'_v \mapsto R^3(\sigma'_v) &= \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \sigma''_v = C_3^2 \sigma_v &\Rightarrow R^3(\sigma''_v) = R^3(C_3^2)R^3(\sigma_v) \Rightarrow \\ \sigma''_v \mapsto R^3(\sigma''_v) &= \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Τέλος, η εκπροσώπηση της ομάδας σημείου με βάση τους χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ'_v	σ''_v
$\Gamma^3(C_{3v})$	3	0	0	1	1	1

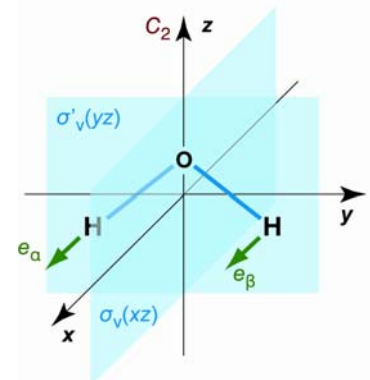
Παρατηρούμε ότι οι χαρακτήρες των εκπροσωπήσεων των διεργασιών συμμετρίας C_3 και C_3^2 , οι οποίες, όπως είδαμε στην παράγραφο 5.6.2, είναι συζυγείς μεταξύ τους και συνιστούν μια κλάση, είναι ίσοι παρόλο που οι μήτρες εκπροσώπησης τους είναι διαφορετικές. Το ίδιο συμβαίνει και με τους χαρακτήρες των διεργασιών σ_v , σ'_v , και σ''_v , οι οποίες αποτελούν επίσης μια κλάση.

6.4.3 Εκπροσώπηση Ομάδων Σημείου με Βάση Διανυσματικούς Χώρους

Για την εύρεση της m -διάστατης εκπροσώπησης μιας ομάδας σημείου με βάση διανυσματικό χώρο επιλέγονται κατ' αρχήν μια σειρά από m διανύσματα που είναι τοποθετημένα σε συγκεκριμένα σημεία του χώρου ή σε άτομα ενός μορίου που ανήκει στην ομάδα σημείου και έχουν συγκεκριμένο προσανατολισμό. Τα ισοδύναμα διανύσματα επισημαίνονται με δείκτες και διατάσσονται σε μια μήτρα στήλη A και στη συνέχεια καταστρώνεται μια μήτρα στήλη A' με τις νέες θέσεις και τα πρόσημα των διανυσμάτων όπως προκύπτουν μετά από την εφαρμογή μιας διεργασίας συμμετρίας X . Τέλος, δομείται μια μήτρα μετασχηματισμού $R(X)$ τέτοια ώστε $A' = R(X)A$. Η μήτρα $R(X)$ αποτελεί εκπροσώπηση της διεργασίας X με βάση το συγκεκριμένο διανυσματικό χώρο και το σύνολο των μητρών εκπροσώπησης των διεργασιών της OS αποτελούν την m -διάστατη εκπροσώπηση της ομάδας σημείου, $OS \mapsto R^m(OS)$.

Εκπροσωπήσεις $C_{2v} \mapsto R^2(C_{2v})$ με βάση διανύσματα

Στο Σχήμα 6.4.3α δίνονται τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας C_{2v} : E , C_2 , $\sigma_v(xz)$, $\sigma'_v(yz)$ και το μόριο H_2O , που ανήκει στην ομάδα σημείου, τοποθετημένο με βάση τους γνωστούς κανόνες ώστε όλα τα άτομα να κείνται επί του επιπέδου yz . Επίσης δίνονται δύο ίσα διανύσματα e_a και e_b τοποθετημένα με αρχή στα άτομα υδρογόνου και φορά παράλληλη προς τον θετικό άξονα x που αποτελούν τη βάση της εκπροσώπησης. Οι μήτρες στήλες με τα διανύσματα πριν και μετά την επίδραση κάθε διεργασίας συμμετρίας καθώς και οι αντίστοιχες μήτρες μετασχηματισμού είναι οι παρακάτω:



Σχήμα 6.4.3α Το μόριο H_2O , τα διανύσματα βάσης και τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας σημείου C_{2v}

$$\begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \end{pmatrix} = R^2(\mathbf{E}) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{E} \mapsto R^2(\mathbf{E}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -e_\beta \\ -e_\alpha \end{pmatrix} = R^2(\mathbf{C}_2) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_2 \mapsto R^2(\mathbf{C}_2) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} e_\beta \\ e_\alpha \end{pmatrix} = R^2(\sigma_v(xz)) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_v(xz) \mapsto R^2(\sigma_v(xz)) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -e_\alpha \\ -e_\beta \end{pmatrix} = R^2(\sigma'_v(yz)) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma'_v(yz) \mapsto R^2(\sigma'_v(yz)) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Η δισδιάστατη εκπροσώπηση που προέκυψε είναι μια πιστή εκπροσώπηση $\mathbf{C}_{2v} \mapsto R^2(\mathbf{C}_{2v})$.

Τέλος, η εκπροσώπηση της ομάδας σημείου με βάση τους χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

\mathbf{C}_{2v}	\mathbf{E}	\mathbf{C}_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$
$\Gamma^2(\mathbf{C}_{2v})$	2	0	0	-2

Εκπροσωπήσεις $\mathbf{D}_{3h} \mapsto R^3(\mathbf{D}_{3h})$ με βάση διανύσματα

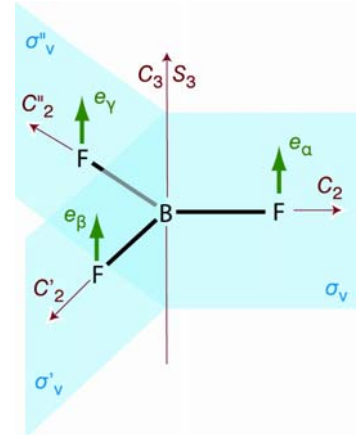
Στο Σχήμα 6.4.3β δίνονται τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας σημείου \mathbf{D}_{3h} : $E, C_3, 3C_2, \sigma_h, S_3, 3\sigma_v$ και το μόριο BF_3 , που ανήκει στην ομάδα σημείου, τοποθετημένο με βάση τους γνωστούς κανόνες ώστε τα άτομα φθορίου να κείνται επί των επιπέδων σ_v, σ'_v και σ''_v αντιστοίχως και το επίπεδο σ_h να οριζείται από τους τρεις άξονες C_2 . Επίσης δίνονται και τρία ίσα διανύσματα e_α, e_β και e_γ τοποθετημένα με αρχή τα άτομα φθορίου και φορά παράλληλη με τον άξονα C_3 που αποτελούν τη βάση της εκπροσώπησης. Οι μήτρες στήλες με τα διανύσματα πριν και μετά την επίδραση κάθε διεργασίας συμμετρίας καθώς και οι αντίστοιχες μήτρες μετασχηματισμού είναι οι παρακάτω.

$$\begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{E}) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{E} \mapsto R^3(\mathbf{E}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} e_\beta \\ e_\gamma \\ e_\alpha \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{C}_3) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_3 \mapsto R^3(\mathbf{C}_3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} e_\gamma \\ e_\alpha \\ e_\beta \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{C}_3^2) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_3^2 \mapsto R^3(\mathbf{C}_3^2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -e_\alpha \\ -e_\gamma \\ -e_\beta \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{C}_2) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_2 \mapsto R^3(\mathbf{C}_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$



Σχήμα 6.4.3β Το μόριο BF_3 , τα διανύσματα βάσης και τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας σημείου \mathbf{D}_{3h}

$$\begin{pmatrix} -e_\gamma \\ -e_\beta \\ -e_\alpha \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{C}'_2) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}'_2 \mapsto R^3(\mathbf{C}'_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -e_\beta \\ -e_\alpha \\ -e_\gamma \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{C}''_2) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}''_2 \mapsto R^3(\mathbf{C}''_2) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -e_\alpha \\ -e_\beta \\ -e_\gamma \end{pmatrix} = R^3(\sigma_h) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_h \mapsto R^3(\sigma_h) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -e_\beta \\ -e_\gamma \\ -e_\alpha \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{S}_3) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{S}_3 \mapsto R^3(\mathbf{S}_3) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -e_\gamma \\ -e_\alpha \\ -e_\beta \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{S}_3^5) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{S}_3^5 \mapsto R^3(\mathbf{S}_3^5) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\gamma \\ e_\beta \end{pmatrix} = R^3(\sigma_v) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_v \mapsto R^3(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} e_\gamma \\ e_\beta \\ e_\alpha \end{pmatrix} = R^3(\sigma'_v) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma'_v \mapsto R^3(\sigma'_v) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} e_\beta \\ e_\alpha \\ e_\gamma \end{pmatrix} = R^3(\sigma''_v) \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_\alpha \\ e_\beta \\ e_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma''_v \mapsto R^3(\sigma''_v) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Η τρισδιάστατη εκπροσώπηση που προέκυψε είναι μια πιστή εκπροσώπηση $\mathbf{D}_{3h} \mapsto R^3(\mathbf{D}_{3h})$.

Τέλος, η εκπροσώπηση της ομάδας σημείου με βάση του χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

\mathbf{D}_{3h}	E	\mathbf{C}_3	\mathbf{C}_3^2	\mathbf{C}_2	\mathbf{C}'_2	\mathbf{C}''_2	σ_h	\mathbf{S}_3	\mathbf{S}_3^5	σ_v	σ'_v	σ''_v
$\Gamma^3(\mathbf{D}_{3h})$	3	0	0	-1	-1	-1	-3	0	0	1	1	1

Παρατηρούμε ότι οι χαρακτήρες των εκπροσώπησεων των διεργασιών συμμετρίας \mathbf{C}_3 και \mathbf{C}_3^2 , που όπως είδαμε στο 5ο κεφάλαιο αποτελούν μια κλάση, είναι ίσοι, παρόλο που οι μήτρες εκπροσώπησης τους είναι διαφορετικές. Το ίδιο συμβαίνει και με τους χαρακτήρες των διεργασιών \mathbf{C}_2 , \mathbf{C}'_2 και \mathbf{C}''_2 , αλλά και των σ_h , σ'_v και σ''_v , οι οποίες αποτελούν επίσης δύο άλλες κλάσεις.

6.4.4 Εκπροσώπηση Ομάδων Σημείου με Βάση Συναρτησιακού Χώρου

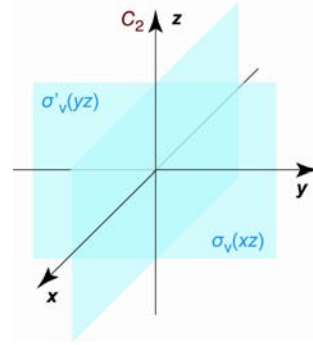
Για την εύρεση της m -διάστατης εκπροσώπησης μιας ομάδας σημείου με βάση συναρτησιακό χώρο επιλέγονται κατ' αρχήν μια σειρά από m συναρτήσεις. Οι συναρτήσεις αυτές, διατάσσονται σε μια μήτρα στήλη A και στη συνέχεια καταστρώνεται η μήτρα στήλη A' με τις μορφές των συναρτήσεων μετά από την εφαρμογή μιας διεργασίας συμμετρίας \mathbf{X} . Στη συνέχεια δομείται μια μήτρα $R(\mathbf{X})$ τέτοια ώστε $A' = R(\mathbf{X})A$. Η μήτρα $R(\mathbf{X})$ αποτελεί εκπροσώπηση της διεργασίας \mathbf{X} με βάση το συγκεκριμένο συναρτησιακό χώρο. Το σύνολο των μητρών

επιπροσώπησης των διεργασιών συμμετρίας της ομάδας σημείου αποτελεί την m -διάστατη επιπροσώπησης της, $\mathbf{O\Sigma} \mapsto \mathbf{R}^m(\mathbf{O\Sigma})$.

Επιπροσωπήσεις $\mathbf{C}_{2v} \mapsto \mathbf{R}^m(\mathbf{C}_{2v})$ με βάση τις καρτεσιανές συναρτήσεις και τα δυαδικά τους γινόμενα

Στο Σχήμα 6.4.4α δίνονται τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας \mathbf{C}_{2v} : E , C_2 , $\sigma_v(xz)$, $\sigma'_v(yz)$ τοποθετημένα στους καρτεσιανούς άξονες. Η μορφή των συναρτήσεων x , y , z , x^2 , y^2 , z^2 , xz , yz και xy μετά την επίδραση κάθε διεργασίας συμμετρίας της ομάδας σημείου δίνονται στον ακόλουθο πίνακα.

\mathbf{C}_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$
x	x	$-x$	x	$-x$
y	y	$-y$	$-y$	y
z	z	z	z	z
x^2	x^2	x^2	x^2	x^2
y^2	y^2	y^2	y^2	y^2
z^2	z^2	z^2	z^2	z^2
xz	xz	$-xz$	xz	$-xz$
yz	yz	$-yz$	$-yz$	yz
xy	xy	xy	$-xy$	$-xy$



Σχήμα 6.4.4α Στοιχεία συμμετρίας της ομάδας \mathbf{C}_{2v}

Οι μήτρες επιπροσώπησης με βάση τις συναρτήσεις x , y και z θα είναι:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{E}) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{E} \mapsto R^3(\mathbf{E}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{C}_2) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_2 \mapsto R^3(\mathbf{C}_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x \\ -y \\ z \end{pmatrix} = R^3(\sigma_v(xz)) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_v(xz) \mapsto R^3(\sigma_v(xz)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -x \\ y \\ z \end{pmatrix} = R^3(\sigma'_v(yz)) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma'_v(yz) \mapsto R^3(\sigma'_v(yz)) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Η επιπροσώπηση που προέκυψε είναι όμοια με την επιπροσώπηση $\mathbf{C}_{2v} \mapsto \mathbf{R}^3(\mathbf{C}_{2v})$ που δομήθηκε προηγουμένως με βάση το διάνυσμα θέσης και συνεπώς προκύπτει και μια ίδια επιπροσώπηση χαρακτήρων της ομάδας σημείου.

Οι μήτρες επιπροσώπησης με βάση τις συναρτήσεις x^2 , y^2 , z^2 , xz , yz και xy θα είναι:

$$\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = R^6(\mathbf{E}) \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{E} \mapsto R^6(\mathbf{E}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ -xz \\ -yz \\ xy \end{pmatrix} = R^6(C_2) \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} \Rightarrow C_2 \mapsto R^6(C_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ -yz \\ -xy \end{pmatrix} = R^6(\sigma_v(xz)) \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_v(xz) \mapsto R^6(\sigma_v(xz)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

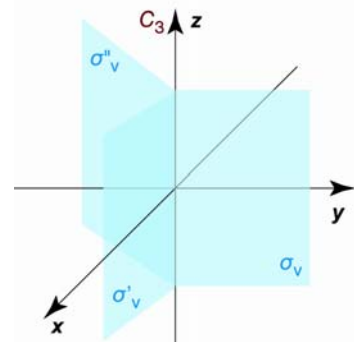
$$\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ -xz \\ yz \\ -xy \end{pmatrix} = R^6(\sigma'_v(yz)) \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma'_v(yz) \mapsto R^6(\sigma'_v(yz)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Η εκπροσώπηση $C_{2v} \mapsto R^6(C_{2v})$ αποτελεί μια πιστή εκπροσώπηση, ενώ η εκπροσώπηση της ομάδας σημείου με βάση τους χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$
$\Gamma^6(C_{2v})$	6	2	2	2

Εκπροσωπήσεις $C_{3v} \mapsto R^m(C_{3v})$ με βάση τις καρτεσιανές συναρτήσεις και τα δυαδικά τους γινόμενα

Στο Σχήμα 6.4.4β δίνονται τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας C_{3v} : $E, C_3, \sigma_v, \sigma'_v, \sigma''_v$ τοποθετημένα στους καρτεσιανούς άξονες. Η μορφή των συναρτήσεων $x, y, z, x^2, y^2, z^2, xz, yz$ και xy μετά την επίδραση κάθε διεργασίας συμμετρίας της ομάδας σημείου δίνονται στον ακόλουθο πίνακα.



Σχήμα 6.4.4β Στοιχεία συμμετρίας της ομάδας C_{3v}

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ'_v	σ''_v
x	x	$-(1/2)x + (\sqrt{3}/2)y$	$-(1/2)x - (\sqrt{3}/2)y$	-x	$(1/2)x - (\sqrt{3}/2)y$	$(1/2)x + (\sqrt{3}/2)y$
y	y	$-(\sqrt{3}/2)x - (1/2)y$	$(\sqrt{3}/2)x - (1/2)y$	y	$-(\sqrt{3}/2)x - (1/2)y$	$(\sqrt{3}/2)x - (1/2)y$
z	z	z	z	z	z	z
x^2	x^2	$(1/4)x^2 + (3/4)y^2 - (\sqrt{3}/2)xy$	$(1/4)x^2 + (3/4)y^2 + (\sqrt{3}/2)xy$	x^2	$(1/4)x^2 + (3/4)y^2 - (\sqrt{3}/2)xy$	$(1/4)x^2 + (3/4)y^2 + (\sqrt{3}/2)xy$
y^2	y^2	$(3/4)x^2 + (1/4)y^2 + (\sqrt{3}/2)xy$	$(3/4)x^2 + (1/4)y^2 - (\sqrt{3}/2)xy$	y^2	$(3/4)x^2 + (1/4)y^2 + (\sqrt{3}/2)xy$	$(3/4)x^2 + (1/4)y^2 - (\sqrt{3}/2)xy$
z^2	z^2	z^2	z^2	z^2	z^2	z^2
xz	xz	$-(1/2)xz + (\sqrt{3}/2)yz$	$-(1/2)xz - (\sqrt{3}/2)yz$	-xz	$(1/2)xz - (\sqrt{3}/2)yz$	$(1/2)xz + (\sqrt{3}/2)yz$
yz	yz	$-(\sqrt{3}/2)xz - (1/2)yz$	$(\sqrt{3}/2)xz - (1/2)yz$	yz	$-(\sqrt{3}/2)xz - (1/2)yz$	$(\sqrt{3}/2)xz - (1/2)yz$
xy	xy	$(\sqrt{3}/4)x^2 - (\sqrt{3}/4)y^2 - (1/2)xy$	$-(\sqrt{3}/4)x^2 - (\sqrt{3}/4)y^2 - (1/2)xy$	-xy	$(\sqrt{3}/4)x^2 + (\sqrt{3}/4)y^2 + (1/2)xy$	$(\sqrt{3}/4)x^2 - (\sqrt{3}/4)y^2 + (1/2)xy$

Οι μήτρες εκπροσώπησης με βάση τις συναρτήσεις x, y και z θα είναι:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{E}) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{E} \mapsto R^3(\mathbf{E}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -(1/2)x + (\sqrt{3}/2)y \\ -(\sqrt{3}/2)x - (1/2)y \\ z \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{C}_3) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_3 \mapsto R^3(\mathbf{C}_3) = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -(1/2)x - (\sqrt{3}/2)y \\ (\sqrt{3}/2)x - (1/2)y \\ z \end{pmatrix} = R^3(\mathbf{C}_3^2) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_3^2 \mapsto R^3(\mathbf{C}_3^2) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -x \\ y \\ z \end{pmatrix} = R^3(\sigma_v) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_v \mapsto R^3(\sigma_v) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} (1/2)x - (\sqrt{3}/2)y \\ -(\sqrt{3}/2)x - (1/2)y \\ z \end{pmatrix} = R^3(\sigma'_v(jz)) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma'_v \mapsto R^3(\sigma'_v) = \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} (1/2)x + (\sqrt{3}/2)y \\ (\sqrt{3}/2)x - (1/2)y \\ z \end{pmatrix} = R^3(\sigma''_v(jz)) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma''_v \mapsto R^3(\sigma''_v) = \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Η εκπροσώπηση που προέκυψε είναι όμοια με την εκπροσώπηση $\mathbf{C}_{3v} \mapsto R^3(\mathbf{C}_{3v})$ που δομήθηκε προηγουμένως με βάση το διάνυσμα θέσης και συνεπώς προκύπτει και μια ίδια εκπροσώπηση χαρακτηριστών της ομάδας σημείου.

Οι μήτρες εκπροσώπησης με βάση τις συναρτήσεις x^2, y^2, z^2, xz, yz και xy θα είναι:

$$\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = R^6(\mathbf{E}) \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{E} \mapsto R^6(\mathbf{E}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} (1/4)x^2 + (3/4)y^2 - (\sqrt{3}/2)xy \\ (3/4)x^2 + (1/4)y^2 + (\sqrt{3}/2)xy \\ z^2 \\ -(1/2)xz + (\sqrt{3}/2)yz \\ -(\sqrt{3}/2)xz - (1/2)yz \\ (\sqrt{3}/4)x^2 - (\sqrt{3}/4)y^2 - (1/2)xy \end{pmatrix} = R^6(\mathbf{C}_3) \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ \sqrt{3}/4 & -\sqrt{3}/4 & 0 & 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_3 \mapsto R^6(\mathbf{C}_3) = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ \sqrt{3}/4 & -\sqrt{3}/4 & 0 & 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} (1/4)x^2 + (3/4)y^2 + (\sqrt{3}/2)xy \\ (3/4)x^2 + (1/4)y^2 - (\sqrt{3}/2)xy \\ z^2 \\ -(1/2)xz - (\sqrt{3}/2)yz \\ (\sqrt{3}/2)xz - (1/2)yz \\ -(\sqrt{3}/4)x^2 - (\sqrt{3}/4)y^2 - (1/2)xy \end{pmatrix} = R^6(\sigma_v) \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/4 & -\sqrt{3}/4 & 0 & 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_v \mapsto R^6(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/4 & -\sqrt{3}/4 & 0 & 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ -xz \\ yz \\ -xy \end{pmatrix} = R^6(\sigma'_v) \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{E} \mapsto R^6(\sigma'_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} (1/4)x^2+(3/4)y^2-(\sqrt{3}/2)xy \\ (3/4)x^2+(1/4)y^2+(\sqrt{3}/2)xy \\ z^2 \\ (1/2)xz-(\sqrt{3}/2)yz \\ -(\sqrt{3}/2)xz-(1/2)yz \\ (-\sqrt{3}/4)x^2+(\sqrt{3}/4)y^2+(1/2)xy \end{pmatrix} = R^6(\sigma'_v) = \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/4 & \sqrt{3}/4 & 0 & -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma'_v \mapsto R^6(\sigma'_v) = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/4 & \sqrt{3}/4 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} (1/4)x^2+(3/4)y^2+(\sqrt{3}/2)xy \\ (3/4)x^2+(1/4)y^2-(\sqrt{3}/2)xy \\ z^2 \\ (1/2)xz+(\sqrt{3}/2)yz \\ (\sqrt{3}/2)xz-(1/2)yz \\ (\sqrt{3}/4)x^2-(\sqrt{3}/4)y^2+(1/2)xy \end{pmatrix} = R^6(\sigma''_v) = \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/4 & -\sqrt{3}/4 & 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xz \\ yz \\ xy \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma''_v \mapsto R^6(\sigma''_v) = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ \sqrt{3}/4 & -\sqrt{3}/4 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

Η εκπροσώπηση $C_{3v} \mapsto R^6(C_{3v})$ αποτελεί μια πιστή εκπροσώπηση, ενώ η εκπροσώπηση της ομάδας σημείου με βάση τους χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

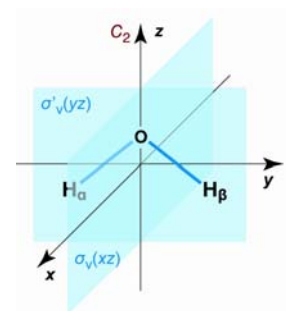
C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ'_v	σ''_v
$\Gamma^3(C_{3v})$	6	0	0	2	2	2

6.4.5 Εκπροσώπηση Ομάδων Σημείου με Βάση τις Μεταθέσεις Ατόμων του Μορίου

Κατά την εφαρμογή των διεργασιών συμμετρίας μιας ομάδας σημείου τα άτομα ενός μορίου που ανήκουν σ' αυτήν παραμένουν στη θέση τους ή μετατίθενται σε ισοδύναμες θέσεις δηλαδή σε θέσεις όμοιων ατόμων. Για την εύρεση της m -διάστατης εκπροσώπησης μιας ομάδας σημείου τα m άτομα ενός μορίου αφού επισημανθούν με δείκτες, διατάσσονται σε μια μήτρα στήλη A και στη συνέχεια καταστρώνεται η μήτρα στήλη A' με τις νέες θέσεις των ατόμων όπως προκύπτουν μετά από την εφαρμογή μιας διεργασίας συμμετρίας X . Στη συνέχεια δομείται μια μήτρα $R(X)$ τέτοια ώστε $A'=R(X)A$. Η μήτρα $R(X)$ αποτελεί εκπροσώπηση της διεργασίας X και το σύνολο των μητρών την m -διάστατη εκπροσώπηση της ομάδας σημείου, $O\Sigma \mapsto R^m(O\Sigma)$.

Εκπροσωπήσεις $C_{2v} \mapsto R^m(C_{2v})$ με βάση τις μεταθέσεις των ατόμων του H_2O

Στο Σχήμα 6.4.5α δίνονται τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας C_{2v} : E , C_2 , $\sigma_v(xz)$, $\sigma'_v(yz)$ και το μόριο H_2O που ανήκει στην ομάδα σημείου τοποθετημένο στους καρτεσιανούς άξονες σύμφωνα με τους γνωστούς κανόνες (παράγραφος 6.4.1) ώστε όλα τα άτομα να κείνται επί του επιπέδου xz . Οι μήτρες στήλες με τα άτομα πριν και μετά την επίδραση κάθε διεργασίας και οι αντίστοιχες μήτρες μετασχηματισμού είναι οι παρακάτω.



Σχήμα 6.4.5α Το μόριο H_2O και τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας σημείου C_{2v}

$$\begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} = R^3(E) \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow E \mapsto R^3(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} O \\ H_\beta \\ H_\alpha \end{pmatrix} = R^3(C_2) \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow C_2 \mapsto R^3(C_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} O \\ H_\beta \\ H_\alpha \end{pmatrix} = R^3(\sigma_v(xz)) \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_v(xz) \mapsto R^3(\sigma_v(xz)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} = R^3(\sigma'_v(yz)) \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma'_v(yz) \mapsto R^3(\sigma'_v(yz)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Στην τριδιάστατη εκπροσώπηση $C_{2v} \mapsto R^3(C_{2v})$ που προέκυψε παρατηρούμε ότι τα ζεύγη των διεργασιών ($E, \sigma'_v(yz)$) και ($C_2, \sigma_v(xz)$) εκπροσωπούνται από την ίδια μήτρα. Συνεπώς, η εκπροσώπηση αυτή αποτελεί μια *μη πιστή εκπροσώπηση*. Η εκπροσώπηση της ομάδας σημείου με βάση τους χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$
$\Gamma^3(C_{2v})$	3	1	1	3

Κατά την επίδραση των διεργασιών συμμετρίας παρατηρούμε ότι κάθε άτομο υδρογόνου παραμένει στη θέση του ή μετατίθεται στη θέση του άλλου ατόμου υδρογόνου. Αντίθετα, το άτομο του οξυγόνου παραμένει πάντα στη θέση του. Αυτό μας δίνει τη δυνατότητα να δομήσουμε τη διδιάστατη εκπροσώπηση $C_{2v} \mapsto R^2(C_{2v})$ με βάση μόνο τα άτομα του υδρογόνου ως εξής:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} &= R^2(E) \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow E \mapsto R^2(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} H_\beta \\ H_\alpha \end{pmatrix} &= R^2(C_2) \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow C_2 \mapsto R^2(C_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} H_\beta \\ H_\alpha \end{pmatrix} &= R^2(\sigma_v(xz)) \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_v(xz) \mapsto R^2(\sigma_v(xz)) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} &= R^2(\sigma'_v(yz)) \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma'_v(yz) \mapsto R^2(\sigma'_v(yz)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Η εκπροσώπηση αυτή της ομάδας σημείου με βάση του χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$
$\Gamma^2(C_{2v})$	2	0	0	2

Επίσης μπορούμε να δομήσουμε τη μονοδιάστατη εκπροσώπηση $C_{2v} \mapsto R^1(C_{2v})$ με βάση μόνο το άτομο του οξυγόνου ως εξής:

$$\begin{aligned} (O) &= R^1(E)(O) = (1)(O) \Rightarrow E \mapsto R^1(E) = (1) \\ (O) &= R^1(C_2)(O) = (1)(O) \Rightarrow C_2 \mapsto R^1(C_2) = (1) \\ (O) &= R^1(\sigma_v(xz))(O) = (1)(O) \Rightarrow \sigma_v(xz) \mapsto R^1(\sigma_v(xz)) = (1) \\ (O) &= R^1(\sigma'_v(yz))(O) = (1)(O) \Rightarrow \sigma'_v(yz) \mapsto R^1(\sigma'_v(yz)) = (1) \end{aligned}$$

Η εκπροσώπηση αυτή της ομάδας σημείου με βάση του χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$
$\Gamma^1(C_{2v})$	1	1	1	1

Από τα παραπάνω συνάγεται ότι τα άτομα που μπορούν να συμπεριληφθούν στη βάση της εκπροσώπησης μπορεί να είναι ένα μέρος των ατόμων του μορίου, αρκεί βέβαια κάθε άτομο της βάσης να μετατίθεται στη θέση ενός άλλου ατόμου της βάσης. Για παράδειγμα η βάση δε μπορεί να συνίσταται από τα άτομα O και H_x, καθόσον όπως εύκολα διαπιστώνεται το H_x με την επίδραση των διεργασιών C₂ και σ_v(xz) μετατίθεται στη θέση του H_β το οποίο δεν ανήκει στη βάση και έτσι δεν είναι δυνατή η δόμηση των αντίστοιχων μητρών μετασχηματισμού και τελικά της εκπροσώπησης, όπως φαίνεται στη συνέχεια.

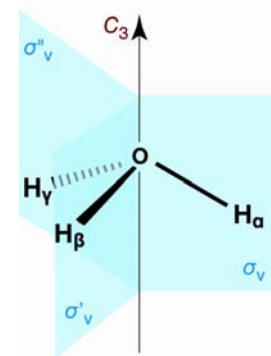
$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \end{pmatrix} &= R^2(\mathbf{E}) \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{E} \mapsto R^2(\mathbf{E}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} O \\ H_\beta \end{pmatrix} &= R^2(\mathbf{C}_2) \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & ? \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_2 \mapsto ? \\ \begin{pmatrix} O \\ H_\beta \end{pmatrix} &= R^2(\sigma_v(xz)) \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & ? \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_v(xz) \mapsto ? \\ \begin{pmatrix} O \\ H_\gamma \end{pmatrix} &= R^2(\sigma'_v(yz)) \begin{pmatrix} O \\ H_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma'_v(yz) \mapsto R^2(\sigma'_v(yz)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Τα παραπάνω ισχύουν για όλα τα είδη των βάσεων. Έτσι, κάθε βάση εκπροσώπησης πρέπει να είναι πλήρης, δηλαδή η επίδραση των διεργασιών συμμετρίας να μετασχηματίζει κάθε στοιχείο της βάσης σε στοιχείο που ανήκει στη βάση.

Εκπροσωπήσεις $\mathbf{C}_{3v} \mapsto R^m(\mathbf{C}_{3v})$ με βάση τις μεταθέσεις των ατόμων της NH_3

Στο Σχήμα 6.4.5β δίνονται τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας \mathbf{C}_{3v} : E , C_3 , σ_v , σ'_v , σ''_v και το μόριο NH_3 που ανήκει στην ομάδα τοποθετημένο σύμφωνα με τους γνωστούς κανόνες (παράγραφος 6.4.1) ώστε τα άτομα H_α , H_β και H_γ να κείνται επί των επιπέδων σ_v , σ'_v και σ''_v αντιστοίχως. Οι μήτρες στήλες με τα άτομα πριν και μετά την επίδραση κάθε διεργασίας συμμετρίας και οι αντίστοιχες μήτρες μετασχηματισμού είναι οι παρακάτω.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} &= R^4(\mathbf{E}) \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{E} \mapsto R^4(\mathbf{E}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} N \\ H_\beta \\ H_\gamma \\ H_\alpha \end{pmatrix} &= R^4(\mathbf{C}_3) \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_3 \mapsto R^4(\mathbf{C}_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} N \\ H_\gamma \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} &= R^4(\mathbf{C}_3^2) \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{C}_3^2 \mapsto R^4(\mathbf{C}_3^2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\gamma \\ H_\beta \end{pmatrix} &= R^4(\sigma_v) \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_v \mapsto R^4(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$



Σχήμα 6.4.5β Το μόριο NH_3 και τα στοιχεία συμμετρίας της ομάδας σημείου \mathbf{C}_{3v}

$$\begin{pmatrix} N \\ H_\gamma \\ H_\beta \\ H_\alpha \end{pmatrix} = R^4(\sigma'_v) \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma'_v \mapsto R^4(\sigma'_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} N \\ H_\beta \\ H_\alpha \\ H_\gamma \end{pmatrix} = R^4(\sigma''_v) \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma''_v \mapsto R^4(\sigma''_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Η τετραδιάστατη εκπροσώπηση που προέκυψε είναι μια πιστή εκπροσώπηση $C_{3v} \mapsto R^4(C_{3v})$. Η εκπροσώπηση της ομάδας σημείου με βάση του χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ'_v	σ''_v
$\Gamma^4(C_{3v})$	4	1	1	2	2	2

Παρατηρούμε ότι οι χαρακτήρες των εκπροσώπησεων των διεργασιών συμμετρίας C_3 και C_3^2 , που όπως είδαμε στο προηγούμενο αποτελούν μια κλάση, είναι ίσοι, παρόλο που οι μήτρες εκπροσώπησης τους είναι διαφορετικές. Το ίδιο συμβαίνει και με τους χαρακτήρες των διεργασιών σ_v , σ'_v και σ''_v , οι οποίες όπως θα δούμε στη συνέχεια αποτελούν επίσης μια κλάση.

Μπορούμε επίσης να δομήσουμε την τριδιάστατη εκπροσώπηση $C_{3v} \mapsto R^3(C_{3v})$ με βάση μόνο τα άτομα του υδρογόνου ως εξής:

$$\begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = R^3(E) \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow E \mapsto R^3(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} H_\beta \\ H_\gamma \\ H_\alpha \end{pmatrix} = R^3(C_3) \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow C_2 \mapsto R^3(C_3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} H_\gamma \\ H_\alpha \\ H_\beta \end{pmatrix} = R^3(C_3^2) \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow C_3^2 \mapsto R^3(C_3^2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\gamma \\ H_\beta \end{pmatrix} = R^3(\sigma_v) \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_v \mapsto R^3(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} H_\gamma \\ H_\beta \\ H_\alpha \end{pmatrix} = R^3(\sigma'_v) \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma'_v \mapsto R^3(\sigma'_v) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} H_\beta \\ H_\alpha \\ H_\gamma \end{pmatrix} = R^3(\sigma''_v) \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_\alpha \\ H_\beta \\ H_\gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma''_v \mapsto R^3(\sigma''_v) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Η αντίστοιχη εκπροσώπηση της ομάδας σημείου με βάση του χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ'_v	σ''_v
$\Gamma^2(C_{3v})$	3	0	0	1	1	1

Τέλος, μια ακόμη μονοδιάστατη εκπροσώπηση $C_{3v} \mapsto R^1(C_{3v})$ δομείται με βάση μόνο το άτομο του αζώτου ως εξής:

$$\begin{aligned} (N) &= R^1(E)(N) = (1)(N) \Rightarrow E \mapsto R^1(E) = (1) \\ (N) &= R^1(C_3)(N) = (1)(N) \Rightarrow C_3 \mapsto R^1(C_3) = (1) \\ (N) &= R^1(C_3^2)(N) = (1)(N) \Rightarrow C_3^2 \mapsto R^1(C_3^2) = (1) \\ (N) &= R^1(\sigma_v)(N) = (1)(N) \Rightarrow \sigma_v \mapsto R^1(\sigma_v) = (1) \\ (N) &= R^1(\sigma'_v)(N) = (1)(N) \Rightarrow \sigma'_v \mapsto R^1(\sigma'_v) = (1) \\ (N) &= R^1(\sigma''_v)(N) = (1)(N) \Rightarrow \sigma''_v \mapsto R^1(\sigma''_v) = (1) \end{aligned}$$

Η εκπροσώπηση της ομάδας σημείου με βάση του χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης είναι:

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ'_v	σ''_v
$\Gamma^1(C_{3v})$	1	1	1	1	1	1

6.5 Αναγώγιμες και μη Αναγώγιμες Εκπροσωπήσεις

6.5.1 Ορισμός αναγώγιμων και μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων

Στις παραγράφους 6.3 και 6.4 αναλύθηκαν μια σειρά δισηδιάστατων και τρισηδιάστατων εκπροσωπήσεων μητρών και χαρακτήρων αφηρημένων ομάδων και ομάδων σημείου. Οι μήτρες εκπροσώπησης των στοιχείων ή διεργασιών των ομάδων, όπως θα δούμε στη συνέχεια, μπορούν να αναλυθούν σε απλούστερες εκπροσωπήσεις μικρότερης διάστασης. Στη θεωρία των ομάδων η διαδικασία ανάλυσης μιας μήτρας εκπροσώπησης σε μια σειρά εκπροσωπήσεων μικρότερης διάστασης καλείται *αναγωγή*. Η εκπροσώπηση που μπορεί να αναχθεί σε εκπροσωπήσεις μικρότερης διάστασης καλείται *αναγώγιμη εκπροσώπηση*, ενώ αυτή που δεν είναι δυνατόν να αναχθεί καλείται *μη αναγώγιμη εκπροσώπηση*.

6.5.2 Αναγωγή αναγώγιμων σε μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις

Οι μήτρες $R^3(\mathbf{X})$ που συνιστούν την τρισηδιάστατη εκπροσώπηση $R^3(C_{2v})$ της ομάδας σημείου C_{2v} με βάση το διάνυσμα θέσης, που προέκυψε στην παράγραφο 6.4.2 έχουν μια ενδιαφέρουσα τοπολογία. Συγκεκριμένα μπορούν να αναλυθούν κατά τη διαγώνιό τους σε τρεις τομείς με μη μηδενικά στοιχεία έτσι ώστε όλα τα εκτός των τομέων να είναι μηδενικά.

$$R^3(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R^3(C_2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R^3(\sigma_v(xz)) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R^3(\sigma'_v(yz)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Έτσι μπορούν να γραφούν ως άμεσο άθροισμα τριών μητρών $R^1_\alpha(X)$, $R^1_\beta(X)$ και $R^1_\gamma(X)$ διαστάσεων 1×1 , όπως φαίνεται παρακάτω.

$$\begin{aligned} R^3(\mathbf{E}) &= R_\alpha^1(\mathbf{E}) \oplus R_\beta^1(\mathbf{E}) \oplus R_\gamma^1(\mathbf{E}) \\ R^3(\mathbf{C}_2) &= R_\alpha^1(\mathbf{C}_2) \oplus R_\beta^1(\mathbf{C}_2) \oplus R_\gamma^1(\mathbf{C}_2) \\ R^3(\sigma_v(xz)) &= R_\alpha^1(\sigma_v(xz)) \oplus R_\beta^1(\sigma_v(xz)) \oplus R_\gamma^1(\sigma_v(xz)) \\ R^3(\sigma_v(yz)) &= R_\alpha^1(\sigma_v(yz)) \oplus R_\beta^1(\sigma_v(yz)) \oplus R_\gamma^1(\sigma_v(yz)) \end{aligned}$$

όπου

$$\begin{aligned} R_\alpha^1(\mathbf{E}) &= (1) & R_\alpha^1(\mathbf{C}_2) &= (-1) & R_\alpha^1(\sigma_v(xz)) &= (-1) & R_\alpha^1(\sigma_v(yz)) &= (1) \\ R_\beta^1(\mathbf{E}) &= (1) & R_\beta^1(\mathbf{C}_2) &= (-1) & R_\beta^1(\sigma_v(xz)) &= (1) & R_\beta^1(\sigma_v(yz)) &= (-1) \\ R_\gamma^1(\mathbf{E}) &= (1) & R_\gamma^1(\mathbf{C}_2) &= (1) & R_\gamma^1(\sigma_v(xz)) &= (1) & R_\gamma^1(\sigma_v(yz)) &= (1) \end{aligned}$$

Έτσι, κάθε εκπροσώπηση $R^3(\mathbf{X})$ μιας διεργασίας \mathbf{X} της ομάδας, ανάγεται σε τρεις μονοδιάστατες εκπροσωπήσεις του στοιχείου $R_\alpha^1(\mathbf{X})$, $R_\beta^1(\mathbf{X})$ και $R_\gamma^1(\mathbf{X})$. Από τους κανόνες πολλαπλασιασμού μητρών που διατάσσονται σε τομείς και συνεπώς αποτελούν άμεσο άθροισμα μικρότερων μητρών εύκολα προκύπτει ότι για το αντίστροφο στοιχείο \mathbf{A}^{-1} και το γινόμενο των εκπροσωπήσεων οποιωνδήποτε δύο στοιχείων (π.χ. \mathbf{A} και \mathbf{B}) θα ισχύει:

$$R^3(\mathbf{A})^{-1} = R^3(\mathbf{B}) \Leftrightarrow \begin{cases} R_\alpha^1(\mathbf{A})^{-1} = R_\alpha^1(\mathbf{B}) \\ R_\beta^1(\mathbf{A})^{-1} = R_\beta^1(\mathbf{B}) \text{ και } R^3(\mathbf{A})R^3(\mathbf{B}) = R^3(\mathbf{C}) \\ R_\gamma^1(\mathbf{A})^{-1} = R_\gamma^1(\mathbf{B}) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} R_\alpha^1(\mathbf{A})R_\alpha^1(\mathbf{B}) = R_\alpha^1(\mathbf{C}) \\ R_\beta^1(\mathbf{A})R_\beta^1(\mathbf{B}) = R_\beta^1(\mathbf{C}) \\ R_\gamma^1(\mathbf{A})R_\gamma^1(\mathbf{B}) = R_\gamma^1(\mathbf{C}) \end{cases}$$

Από τα παραπάνω είναι προφανές ότι τα σύνολα μητρών \mathbf{R}_α^1 , \mathbf{R}_β^1 και \mathbf{R}_γ^1 αποτελούν επίσης ομάδα, έχουν τον ίδιο πίνακα πολλαπλασιασμού με την ομάδα $\mathbf{R}^3(\mathbf{C}_{2v})$ και κατά συνέπεια και με την ομάδα σημείου \mathbf{C}_{2v} . Επομένως, οι ομάδες \mathbf{R}_α^1 , \mathbf{R}_β^1 και \mathbf{R}_γ^1 αποτελούν τρεις νέες εκπροσωπήσεις της ομάδας \mathbf{C}_{2v} , δηλαδή $\mathbf{C}_{2v} \mapsto \mathbf{R}_\alpha^1(\mathbf{C}_{2v})$, $\mathbf{C}_{2v} \mapsto \mathbf{R}_\beta^1(\mathbf{C}_{2v})$ και $\mathbf{C}_{2v} \mapsto \mathbf{R}_\gamma^1(\mathbf{C}_{2v})$. Έτσι, η τριδιάστατη εκπροσώπηση $\mathbf{R}^3(\mathbf{C}_{2v})$ είναι μια αναγώγιμη εκπροσώπηση και ανάγεται στις τρεις μονοδιάστατες εκπροσωπήσεις $\mathbf{R}_\alpha^1(\mathbf{C}_{2v})$, $\mathbf{R}_\beta^1(\mathbf{C}_{2v})$ και $\mathbf{R}_\gamma^1(\mathbf{C}_{2v})$, οι οποίες είναι μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις, καθόσον είναι προφανές ότι δε μπορούν να αναχθούν σε εκπροσωπήσεις μικρότερης διάστασης.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχουν οι εκπροσωπήσεις της ομάδας σημείου με βάση τους χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης που αποτελούν την αναγώγιμη και μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις. Εύκολα διαπιστώνεται ότι οι εκπροσωπήσεις αυτές είναι:

\mathbf{C}_{2v}	\mathbf{E}	\mathbf{C}_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
$\Gamma^3(\mathbf{C}_{2v})$	3	-1	1	1
$\Gamma_\alpha^1(\mathbf{C}_{2v})$	1	-1	-1	1
$\Gamma_\beta^1(\mathbf{C}_{2v})$	1	-1	1	-1
$\Gamma_\gamma^1(\mathbf{C}_{2v})$	1	1	1	1

Παρατηρούμε ότι η αναγώγιμη εκπροσώπηση χαρακτήρων αποτελεί απλώς το άθροισμα των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων χαρακτήρων. Συγκεκριμένα, κάθε χαρακτήρας μιας διεργασίας στην αναγώγιμη εκπροσώπηση είναι ίσος με το άθροισμα των χαρακτήρων των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων της συγκεκριμένης διεργασίας.

Ας έλθουμε τώρα στην παρακάτω διδιάστατη εκπροσώπηση $\mathbf{R}^2(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ της ομάδας $\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2$ που αναλύθηκε στην παράγραφο 6.4.1.

$$R^2(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R^2(A) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad R^2(B) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad R^2(C) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Οι μήτρες εκπροσώπησης που την αποτελούν είναι εμφανές ότι δεν αποτελούνται από τομείς διατεταγμένους στη διαγώνιο τους και συνεπώς δεν μπορούν να αναχθούν τουλάχιστον με προφανή τρόπο. Αποδεικνύεται όμως ότι μια τετραγωνική μήτρα R μπορεί πολλές φορές να μετασχηματισθεί σε μια συζυγή μήτρα R' που αποτελείται από τομείς κατά τη διαγώνιο της με έναν μετασχηματισμό ομοιότητας από μια άλλη μήτρα S . Ο μετασχηματισμός ομοιότητας έχει τη μορφή:

$$S^{-1}RS = R'$$

Έτσι, αν χρησιμοποιήσουμε την παρακάτω μήτρα S και την αντίστροφό της S^{-1} ,

$$S = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \quad S^{-1} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

για το μετασχηματισμό ομοιότητας των εκπροσωπήσεων $R^2(X)$ εύκολα προκύπτει ότι:

$$R'^2(E) = S^{-1}R^2(E)S = \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array} \right) \quad R'^2(A) = S^{-1}R^2(A)S = \left(\begin{array}{c|c} -1 & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array} \right)$$

$$R'^2(B) = S^{-1}R^2(B)S = \left(\begin{array}{c|c} -1 & 0 \\ \hline 0 & -1 \end{array} \right) \quad R'^2(C) = S^{-1}R^2(C)S = \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & -1 \end{array} \right)$$

Το νέο σύνολο μητρών που προέκυψε εύκολα διαπιστώνεται ότι είναι μια ομάδα ισόμορφη τόσο της $\mathbf{R}^2(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ όσο και της $\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2$ και συνεπώς αποτελεί μια νέα δισδιάστατη εκπροσώπηση $\mathbf{R}^2(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$. Επειδή η $\mathbf{R}^2(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ προέκυψε από το μετασχηματισμό ομοιότητας όλων των μητρών της $\mathbf{R}^2(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ με την ίδια μήτρα μετασχηματισμού S οι δύο εκπροσωπήσεις καλούνται *όμοιες εκπροσωπήσεις*.

Η εκπροσώπηση $\mathbf{R}^2(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ αποτελεί μια αναγώγιμη εκπροσώπηση και μπορεί να αναχθεί σε δύο μονοδιάστατες μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις, όπως φαίνεται παρακάτω.

$$R_\alpha^1(E) = (1) \quad R_\alpha^1(A) = (-1) \quad R_\alpha^1(B) = (-1) \quad R_\alpha^1(C) = (1)$$

$$R_\delta^1(E) = (1) \quad R_\delta^1(A) = (1) \quad R_\delta^1(B) = (-1) \quad R_\delta^1(C) = (-1)$$

$$R'^2(E) = R_\alpha^1(E) \oplus R_\delta^1(E), R'^2(A) = R_\alpha^1(A) \oplus R_\delta^1(A), R'^2(B) = R_\alpha^1(B) \oplus R_\delta^1(B), R'^2(C) = R_\alpha^1(C) \oplus R_\delta^1(C)$$

Συνεπώς και η $\mathbf{R}^2(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ αποτελεί επίσης μια αναγώγιμη εκπροσώπηση, η οποία όμως καθίσταται αναγώγιμη μετά από έναν μετασχηματισμό ομοιότητας. Από τις μονοδιάστατες εκπροσωπήσεις που προέκυψαν η $\mathbf{R}_\alpha^1(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ είχε προκύψει και από την αναγωγή της $\mathbf{R}^3(\mathbf{C}_{2v})$ καθώς οι \mathbf{C}_{2v} και $\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2$ είναι ισομορφικές ομάδες, ενώ η $\mathbf{R}_\delta^1(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ αποτελεί νέα μη αναγώγιμη εκπροσώπηση. Έτσι, για την ομάδα $\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2$ αλλά και την ισομορφική της \mathbf{C}_{2v} βρέθηκαν οι τέσσερις μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις $\mathbf{R}_\alpha^1(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$, $\mathbf{R}_\beta^1(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$, $\mathbf{R}_\gamma^1(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ και $\mathbf{R}_\delta^1(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$. Από τον παρακάτω πίνακα των αντίστοιχων εκπροσωπήσεων χαρακτηρών προκύπτει ότι οι χαρακτήρες των όμοιων εκπροσωπήσεων $\Gamma^2(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ και $\Gamma^2(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ είναι ίσοι και ότι η αναγώγιμη εκπροσώπηση χαρακτηρών αποτελεί απλώς το άθροισμα των μη αναγώγιμων $\Gamma_\alpha^1(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$ και $\Gamma_\delta^1(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$,

$\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2$	E	A	B	C
$\Gamma^2(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$	2	0	-2	0
$\Gamma^2(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$	2	0	-2	0
$\Gamma_\alpha^1(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$	1	-1	-1	1
$\Gamma_\delta^1(\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{Z}_2)$	1	1	-1	-1

Η παρακάτω τριδιάστατη εκπροσώπηση $\mathbf{R}^3(\mathbf{Z}_3)$ της ομάδας \mathbf{Z}_3 που αναλύθηκε στην προηγούμενη παράγραφο

$$R^3(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R^3(A) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad R^3(B) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

φαίνεται κατ' αρχήν ότι αποτελεί μια μη αναγώγιμη εκπροσώπηση καθόσον οι μήτρες που την αποτελούν είναι εμφανές ότι δεν αποτελούνται από τομείς διατεταγμένους στη διαγώνιό τους. Αν όμως όλες οι μήτρες υποστούν ένα μετασχηματισμό ομοιότητας με βάση την παρακάτω μήτρα S και την αντίστροφό της S^{-1} ,

$$S = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 1 & \sqrt{3} & 1 \\ 1 & -\sqrt{3} & 1 \end{pmatrix} \quad S^{-1} = \begin{pmatrix} -1/3 & 1/6 & 1/6 \\ 0 & \sqrt{3}/6 & -\sqrt{3}/6 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{pmatrix}$$

εύκολα προκύπτει ότι:

$$R^{13}(E) = S^{-1}R^3(E)S = \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \quad R^{13}(A) = S^{-1}R^3(A)S = \left(\begin{array}{cc|c} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array} \right)$$

$$R^{13}(B) = S^{-1}R^3(B)S = \left(\begin{array}{cc|c} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array} \right)$$

Το νέο σύνολο μητρών που προέκυψε εύκολα διαπιστώνεται ότι είναι μια ομάδα ισόμορφη τόσο της $\mathbf{R}^3(\mathbf{Z}_3)$ όσο και της \mathbf{Z}_3 και συνεπώς αποτελεί μια νέα τριδιάστατη εκπροσώπηση $\mathbf{R}^3(\mathbf{Z}_3)$ όμοια με την $\mathbf{R}^3(\mathbf{Z}_3)$. Η εκπροσώπηση $\mathbf{R}^3(\mathbf{Z}_3)$ αποτελεί προφανώς μια αναγώγιμη εκπροσώπηση και μπορεί να αναχθεί σε μια διδιάστατη και μια μονοδιάστατη εκπροσώπηση, όπως φαίνεται παρακάτω.

$$R^2(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R^2(A) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix} \quad R^2(B) = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$

$$R^1(E) = (1) \quad R^1(A) = (1) \quad R^1(B) = (1)$$

$$R^{13}(E) = R^2(E) \oplus R^1(E), \quad R^{13}(A) = R^2(A) \oplus R^1(A), \quad R^{13}(B) = R^2(B) \oplus R^1(B)$$

Συνεπώς και η $\mathbf{R}^3(\mathbf{Z}_3)$ αποτελεί επίσης μια αναγώγιμη εκπροσώπηση, η οποία όμως καθίσταται αναγώγιμη μετά από έναν μετασχηματισμό ομοιότητας. Η μονοδιάστατη εκπροσώπηση $\mathbf{R}^1(\mathbf{Z}_3)$ είναι προφανώς μη αναγώγιμη και αποδεικνύεται ότι το ίδιο ισχύει και για την $\mathbf{R}^2(\mathbf{Z}_3)$. Έτσι, για την ομάδα \mathbf{Z}_3 βρέθηκαν οι δύο μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις $\mathbf{R}^1(\mathbf{Z}_3)$ και $\mathbf{R}^2(\mathbf{Z}_3)$.

Τέλος, από τον παρακάτω πίνακα των αντίστοιχων εκπροσωπήσεων χαρακτηρών προκύπτει ότι οι χαρακτηρες των όμοιων εκπροσωπήσεων $\mathbf{R}^3(\mathbf{Z}_3)$ και $\mathbf{R}^3(\mathbf{Z}_3)$ είναι ίσοι και ότι η αναγώγιμη εκπροσώπηση χαρακτηρών $\mathbf{R}^3(\mathbf{Z}_3)$ αποτελεί απλώς το άθροισμα των μη αναγώγιμων $\mathbf{R}^1(\mathbf{Z}_3)$ και $\mathbf{R}^2(\mathbf{Z}_3)$,

\mathbf{Z}_3	E	A	B
$\mathbf{R}^3(\mathbf{Z}_3)$	3	0	0
$\mathbf{R}^3(\mathbf{Z}_3)$	3	0	0
$\mathbf{R}^1(\mathbf{Z}_3)$	1	1	1
$\mathbf{R}^2(\mathbf{Z}_3)$	2	-1	-1

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι για κάθε αφηρημένη ομάδα ή ομάδα σημείου μπορεί να καταστρώσει κανείς πολλές εκπροσωπήσεις. Η διάσταση των εκπροσωπήσεων εξαρτάται από το πλήθος των στοιχείων της βάσης ενώ η δομή τους, δηλαδή οι μήτρες εκπροσώπησης και οι χαρακτηρες τους, από το είδος της βάσης. Πολλές από τις εκπροσωπήσεις είναι αναγώγιμες και ανάγονται σε μη αναγώγιμες. Το πλήθος των αναγώγιμων εκπροσωπήσεων που

είναι δυνατό να καταστρωθούν είναι άπειρο, καθόσον άπειρες είναι και οι βάσεις που μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε. Το πλήθος των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων όμως είναι πεπερασμένο και ισούται πάντα με το πλήθος των κλάσεων μιας ομάδας. Ο κανόνας αυτός, καθώς και πολλές ιδιότητες των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων μιας ομάδας είναι συνέπεια του *μεγάλου θεωρήματος της ορθογωνιότητας* που θα συζητηθεί στο επόμενο κεφάλαιο.

Σύνοψη

1. Για κάθε αφηρημένη ομάδα ή ομάδα σημείου μπορεί να καταστρωθεί μια σειρά από μήτρες που εκπροσωπούν τα στοιχεία ή τις διεργασίες συμμετρίας. Το σύνολο αυτών των μητρών, που αποτελούν ισόμορφη ομάδα της αρχικής αποτελεί την εκπροσώπηση της ομάδας.
2. Οι βάσεις που χρησιμοποιούνται για τη δόμηση των εκπροσωπήσεων μπορεί να είναι ένα διάνυσμα σημείου, ένα σύνολο από διανύσματα ή συναρτήσεις, τα άτομα του μορίου, κ.α.
3. Το ίχνος μιας μήτρας που εκπροσωπεί μια διεργασία συμμετρίας καλείται χαρακτήρας της εκπροσώπησης και το σύνολο των χαρακτήρων των μητρών συνιστούν την εκπροσώπηση χαρακτήρων της ομάδας σημείου.
4. Οι χαρακτήρες συζυγών μητρών, δηλαδή μητρών που εκπροσωπούν διεργασίες συμμετρίας που ανήκουν στην ίδια κλάση είναι ίσοι.
5. Μια εκπροσώπηση ομάδας μπορεί να είναι μη αναγώγιμη ή αναγώγιμη.
6. Μια εκπροσώπηση είναι αναγώγιμη αν οι μήτρες που την συνιστούν αποτελούν άμεσο άθροισμα μητρών μικρότερης τάξης. Πολλές φορές οι μήτρες μιας εκπροσώπησης μετατρέπονται σε άμεσο άθροισμα μητρών μετά από ένα μετασχηματισμό ομοιότητας από μια άλλη μήτρα. Η νέα εκπροσώπηση μητρών είναι όμοια με την αρχική και έχει ίσους χαρακτήρες μητρών.
7. Οι χαρακτήρες των αναγώγιμων εκπροσωπήσεων είναι ίσοι με το άθροισμα των χαρακτήρων των μη αναγώγιμων στις οποίες ανάγονται.
8. Το πλήθος των αναγώγιμων εκπροσωπήσεων που είναι δυνατό να καταστρωθούν είναι άπειρο, ενώ αυτό των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων ισούται με το πλήθος των κλάσεων μιας ομάδας.