# 7. Πίνακες Χαρακτήρων των Ομάδων Σημείου

**Διδακτικοί στόχοι**

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

- αναγνωρίζετε τις συνέπειες του μεγάλου θεωρήματος της ορθογωνικότητας
- διατυπώνετε τις σχέσεις μεταξύ των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων μιας ομάδας σημείου και των χαρακτήρων τους
- εξάγετε τις πληροφορίες που περιέχονται στους πίνακες χαρακτήρων των ομάδων σημείου

**Προαπαιτούμενες γνώσεις**

Ευχέρεια στην εφαρμογή των διεργασιών συμμετρίας περιστροφής, στροφοκατοπτρισμού, κατοπτρισμού και αναστροφής. Γνώση των διεργασιών συμμετρίας που περιέχει κάθε ομάδα σημείου. Κατανόηση της έννοιας της αναγώγιμης και μη αναγώγιμης εκπροσώπησης μιας ομάδας σημείου με μήτρες ή τους χαρακτήρες τους.

## 7.1 Το Μεγάλο Θεώρημα της Ορθογωνικότητας

Στο προηγούμενο κεφάλαιο καταστρώθηκαν μια σειρά από εκπροσωπήσεις μητρών αφηρημένων ομάδων και ομάδων σημείου. Πολλές από αυτές είναι *αναγώγιμες εκπροσωπήσεις* αφού οι μήτρες που την συνιστούν μπορούν να αναλυθούν σε άμεσο άθροισμα μητρών μικρότερης τάξης ή μπορούν να μετατραπούν σε άμεσα αθροίσματα μετά από ένα μετασχηματισμό ομοιότητας από μια άλλη μήτρα. Όταν μια εκπροσώπηση μιας ομάδας δεν είναι δυνατόν να αναχθεί περαιτέρω χαρακτηρίζεται ως *μη αναγώγιμη εκπροσώπηση* της ομάδας.

Μέχρι τώρα έχουν καταστρωθεί μια σειρά μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων ομάδων με την αναγωγή των αναγώγιμων εκπροσωπήσεων που προέκυψαν από διάφορες βάσεις εκπροσώπησης. Ωστόσο ο κατάλογος των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων που έχουν προκύψει μέχρι στιγμής δεν είναι πλήρης. Η δομή και οι ιδιότητες των μητρών που συνιστούν αυτές τις μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις διέπονται από το *μεγάλο θεώρημα* της *ορθογωνικότητας (great orthogonality theorem,* GOT*)* που αποτελεί το βασικό εργαλείο για την εύρεση *του συνόλου* των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων των αφηρημένων ομάδων και συνεπώς και των ισόμορφων με αυτές ομάδων σημείου.

Μια μαθηματική ομάδα ή ομάδα σημείου $\boldsymbol{G}=\{E, A, B, C, \ldots\}$ τάξης $h$ μπορεί να εκπροσωπείται από μια σειρά μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων της ομάδας $\boldsymbol{R}_{\alpha}^{m}(\boldsymbol{G})$, $\boldsymbol{R}_{\beta}^{n}(\boldsymbol{G}),\ldots$ διαστάσεων *m*, *n*,... Κάθε μια από αυτές τις εκπροσωπήσεις αποτελείται από ένα σύνολο $h$ μητρών, π.χ. $\{ \mathrm{R}_{\alpha}^{m}(E), \mathrm{R}_{\alpha}^{m}(A), \mathrm{R}_{\alpha}^{m}(B), \mathrm{R}_{\alpha}^{m}(C),\ldots \}$, κάθε μια από τις οποίες, $\mathrm{R}_{\alpha}^{m}(X)$, είναι μια μη αναγώγιμη μήτρα διάστασης *mxm* που εκπροσωπεί ένα στοιχείο ή μια διεργασία συμμετρίας $X$ της ομάδας $\boldsymbol{G}$.

Το μεγάλο θεώρημα της ορθογωνικότητας αναφέρεται στο άθροισμα των γινομένων των στοιχείων $(\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(X)$, $(\mathrm{R}_{\beta}^{n})_{\mathrm{kl}}(X)$ δύο οποιωνδήποτε μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων της ομάδας, $\boldsymbol{R}_{\alpha}^{m}(\boldsymbol{G})$ και $\boldsymbol{R}_{\beta}^{n}(\boldsymbol{G})$ και διατυπώνεται ως εξής:

$$\sum_{X}(\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(X)\cdot(\mathrm{R}_{\beta}^{n})_{\mathrm{kl}}(X)^{*}=\frac{h}{m}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\mathrm{ik}}\delta_{\mathrm{jl}}$$

όπου $\delta_{\mathrm{ik}}$ ή $\delta_{\mathrm{jl}}$ είναι το δέλτα του Kronecker, οι τιμές των συντελεστών είναι *i, j=1, .., m* και *k, l=1,…,n* και το άθροισμα αφορά όλα τα στοιχεία ή τις διεργασίες συμμετρίας $E$, $A$, $B$, … πλήθους $h$. Το $(\mathrm{R}_{\beta}^{n})_{\mathrm{kl}}(X)^{*}$ είναι ο συζυγής μιγαδικός του στοιχείου $(\mathrm{R}_{\beta}^{n})_{\mathrm{kl}}(X)$ και χρησιμοποιείται διότι σε μερικές ομάδες τα στοιχεία των μητρών εκπροσώπησης είναι μιγαδικοί αριθμοί. Παρόλα αυτά, στην συνέχεια δε θα χρησιμοποιηθεί ο συζυγής μιγαδικός του στοιχείου διότι τα στοιχεία των μητρών εκπροσώπησης της πλειοψηφίας των ομάδων σημείου είναι πραγματικοί αριθμοί. Μια γενική μορφή των δύο μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων και η ανάπτυξη των όρων του αθροίσματος φαίνεται παρακάτω.

$$\boldsymbol{R}_{\alpha}^{m}(\boldsymbol{G}):\begin{pmatrix}\cdots & \cdots & \cdots\\ \vdots & (\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(E) & \vdots\\ \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cdots & \cdots & \cdots\\ \vdots & (\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(A) & \vdots\\ \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cdots & \cdots & \cdots\\ \vdots & (\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(B) & \vdots\\ \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix}\ldots$$

$$\boldsymbol{R}_{\beta}^{n}(\boldsymbol{G}):\begin{pmatrix}\cdots & \cdots & \cdots\\ \vdots & (\mathrm{R}_{\beta}^{n})_{\mathrm{kl}}(E) & \vdots\\ \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cdots & \cdots & \cdots\\ \vdots & (\mathrm{R}_{\beta}^{n})_{\mathrm{kl}}(A) & \vdots\\ \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cdots & \cdots & \cdots\\ \vdots & (\mathrm{R}_{\beta}^{n})_{\mathrm{kl}}(B) & \vdots\\ \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix}\ldots$$

$$(\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(E)\cdot(\mathrm{R}_{\beta}^{n})_{\mathrm{kl}}(E)+(\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(A)\cdot(\mathrm{R}_{\beta}^{n})_{\mathrm{kl}}(A)+(\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(B)\cdot(\mathrm{R}_{\beta}^{n})_{\mathrm{kl}}(B)+\ldots=\frac{h}{m}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\mathrm{ik}}\delta_{\mathrm{jl}}$$

Για να κατανοήσουμε το *GOT* ας πάρουμε σαν παράδειγμα τις παρακάτω τρεις μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις της ομάδας σημείου $\boldsymbol{C_{3v}}$.

| $C_{3v}$ | $E$ | $C_3$ | $C_3^2$ | $\sigma_v$ | $\sigma'_v$ | $\sigma''_v$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $\boldsymbol{R}_{\alpha}^{1}(\boldsymbol{C_{3v}})$ | $(1)$ | $(1)$ | $(1)$ | $(1)$ | $(1)$ | $(1)$ |
| $\boldsymbol{R}_{\beta}^{1}(\boldsymbol{C_{3v}})$ | $(1)$ | $(1)$ | $(1)$ | $(-1)$ | $(-1)$ | $(-1)$ |
| $\boldsymbol{R}_{\gamma}^{2}(\boldsymbol{C_{3v}})$ | $\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix}-1/2 & \sqrt{3}/2\\ -\sqrt{3}/2 & -1/2\end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix}-1/2 & -\sqrt{3}/2\\ \sqrt{3}/2 & -1/2\end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix}1/2 & -\sqrt{3}/2\\ -\sqrt{3}/2 & -1/2\end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix}1/2 & \sqrt{3}/2\\ \sqrt{3}/2 & -1/2\end{pmatrix}$ |

Οι εκπροσωπήσεις $\boldsymbol{R}_{\alpha}^{1}(\boldsymbol{C_{3v}})$ και $\boldsymbol{R}_{\gamma}^{2}(\boldsymbol{C_{3v}})$ προκύπτουν εύκολα από την αναγωγή της αναγώγιμης εκπροσώπησης $\boldsymbol{R}^{3}(\boldsymbol{C_{3v}})$ που καταστρώθηκε στην παράγραφο 6.4.2 της οποίας οι μήτρες δομούνται σε τομείς κατά τη διαγώνιό τους, ενώ η $\boldsymbol{R}_{\beta}^{1}(\boldsymbol{C_{3v}})$ καταστρώνεται με μια άλλη βάση εκπροσώπησης. Η τάξη της ομάδας σημείου είναι $h$=6 και οι διαστάσεις των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων της ομάδας σημείου είναι *α*: 1, *β*: 1 και *γ*: 2.

Από την εφαρμογή του GOT σε διάφορες περιπτώσεις προκύπτουν τα ακόλουθα. Ας σημειωθεί ότι με τον όρο αντίστοιχα στοιχεία δύο μητρών εννοούμε στοιχεία της ίδιας σειράς και της ίδιας στήλης.

*1. Περίπτωση* όπου *α=β* και *i=k, j=l* ($\delta_{\alpha\beta}=1$, $\delta_{\mathrm{ik}}=1$, $\delta_{\mathrm{jl}}=1$): $\sum_{X}(\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(X)\cdot(\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(X)=\sum_{X}(\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(X)^{2}=\frac{h}{m}$

*Το άθροισμα των τετραγώνων των αντίστοιχων στοιχείων των μητρών που συνιστούν μια μη αναγώγιμη εκπροσώπηση* $\boldsymbol{R}_{\alpha}^{m}(\boldsymbol{G})$*) είναι ίσο με το πηλίκο της τάξης της ομάδας h προς τη διάσταση της εκπροσώπησης m.*

Εφαρμογή για την $\boldsymbol{R}_{\gamma}^{2}(\boldsymbol{C_{3v}})$ με i=1, j=2 , $h$=6:

$$(0)^{2}+\left(\sqrt{3}/2\right)^{2}+\left(-\sqrt{3}/2\right)^{2}+(0)^{2}+\left(-\sqrt{3}/2\right)^{2}+\left(\sqrt{3}/2\right)^{2}=3=6/2$$

*2. Περίπτωση* όπου *α=β* και *i≠k ή j≠l* ($\delta_{\alpha\beta}=1$, $\delta_{\mathrm{ik}}=0$ ή $\delta_{\mathrm{jl}}=0$): $\sum_{X}(\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(X)\cdot(\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{kl}}(X)=0$

*Το άθροισμα των γινομένων μη αντίστοιχων στοιχείων των μητρών που συνιστούν μια μη αναγώγιμη εκπροσώπηση είναι ίσο με μηδέν.*

Εφαρμογή για την $\boldsymbol{R}_{\gamma}^{2}(\boldsymbol{C_{3v}})$ με i=1, j=2, k=2, l=1:

$$(0)(0)+\left(\sqrt{3}/2\right)\left(-\sqrt{3}/2\right)+\left(-\sqrt{3}/2\right)\left(\sqrt{3}/2\right)+(0)(0)+\left(-\sqrt{3}/2\right)\left(-\sqrt{3}/2\right)+\left(\sqrt{3}/2\right)\left(\sqrt{3}/2\right)=0$$

*3. Περίπτωση α≠β ανεξάρτητα από τα i-j, k-l* ($\delta_{\alpha\beta}=0$): $\sum_{X}(\mathrm{R}_{\alpha}^{m})_{\mathrm{ij}}(X)\cdot(\mathrm{R}_{\beta}^{n})_{\mathrm{kl}}(X)=0$

*Το άθροισμα των γινομένων αντίστοιχων ή μη αντίστοιχων στοιχείων των μητρών δύο διαφορετικών μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων* $\boldsymbol{R}_{\alpha}^{m}(\boldsymbol{G})$ *και* $\boldsymbol{R}_{\beta}^{n}(\boldsymbol{G})$ *είναι ίσο με μηδέν.*

Εφαρμογή για τις $\boldsymbol{R}_{\gamma}^{2}(\boldsymbol{C_{3v}})$ και $\boldsymbol{R}_{\alpha}^{1}(\boldsymbol{C_{3v}})$ με i=1, j=2, k=1, l=1:

$$(0)(1)+\left(\sqrt{3}/2\right)(1)+\left(-\sqrt{3}/2\right)(1)+(0)(1)+\left(-\sqrt{3}/2\right)(1)+\left(\sqrt{3}/2\right)(1)=0$$

Η φυσική σημασία του GOT έγκειται στο γεγονός ότι *σε έναν διανυσματικό χώρο h διαστάσεων, δύο διανύσματα που αποτελούν βάση για δύο διαφορετικές μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις είναι ορθογωνικά.*

## 7.2 Το Μικρό Θεώρημα της Ορθογωνικότητας

Από μια σειρά μαθηματικούς μετασχηματισμούς του GOT προκύπτει το *μικρό θεώρημα της ορθογωνικότητας (litle orthogonality theorem,* LOT*)*, το οποίο αφορά τους χαρακτήρες των εκπροσωπήσεων. Για μια αναγώγιμη εκπροσώπηση $\boldsymbol{R}_{\alpha}^{m}(\boldsymbol{G})$ διάστασης *m* που αποτελείται από *h* μήτρες, π.χ. $\{R_{\alpha}^{m}(E), R_{\alpha}^{m}(A), R_{\alpha}^{m}(B), R_{\alpha}^{m}(C),...\}$, οι χαρακτήρες των μητρών συμβολίζονται ως $\{\chi_a(E), \chi_a(A), \chi_a(B), \chi_a(C), \ldots\}$. Το μικρό θεώρημα της ορθογωνικότητας αναφέρεται στα γινόμενα των χαρακτήρων $\chi_a(X)$, $\chi_\beta(X)$ των μητρών εκπροσώπησης $R_{\alpha}^{m}(X)$ και $R_{\beta}^{n}(\mathrm{X})$ δύο μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων $\boldsymbol{R}_{\alpha}^{m}(\boldsymbol{G})$, $\boldsymbol{R}_{\beta}^{n}(\boldsymbol{G})$ και διατυπώνεται ως εξής:

$$\sum_{X}\chi_{\alpha}(X)\chi_{\beta}(X)^{*}=h\delta_{\alpha\beta}$$

Το $\chi_{\beta}(X)^{*}$ είναι ο συζυγής μιγαδικός του χαρακτήρα $\chi_{\beta}(X)$ και χρησιμοποιείται μόνο στην περίπτωση ομάδων με μιγαδικούς χαρακτήρες.

Για να κατανοήσουμε το LOT ας πάρουμε σαν παράδειγμα τους χαρακτήρες των παραπάνω τριών αναγώγιμων εκπροσωπήσεων της ομάδας σημείου $\boldsymbol{C_{3v}}$ με τάξη *h*=6, όπου το σύνολο των χαρακτήρων των μητρών μιας εκπροσώπησης $\boldsymbol{R}_{\alpha}^{m}(\boldsymbol{G})$ συμβολίζεται ως $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha}^{m}(\boldsymbol{G})$ ή απλά ως $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha}$

| $\boldsymbol{C_{3v}}$ | $\boldsymbol{E}$ | $\boldsymbol{C}_3$ | $\boldsymbol{C}_3^2$ | $\sigma_v$ | $\sigma'_v$ | $\sigma''_v$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha}^{1}$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| $\boldsymbol{\Gamma}_{\beta}^{1}$ | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 |
| $\boldsymbol{\Gamma}_{\gamma}^{2}$ | 2 | -1 | -1 | 0 | 0 | 0 |

Από την εφαρμογή του LOT σε διάφορες περιπτώσεις προκύπτουν τα ακόλουθα.

1. Αν *a*=*β* *(δ*$_{\alpha\beta}$*=1)* τότε $\sum_{X}\chi_{\alpha}(X)\chi_{\alpha}(X)=\sum_{X}\chi_{\alpha}(X)^{2}=h$

που σημαίνει ότι το άθροισμα των τετραγώνων των χαρακτήρων μιας μη αναγώγιμης εκπροσώπησης είναι ίσο με την τάξης της ομάδας *h*. Έτσι, για την $\boldsymbol{\Gamma}_{\gamma}^{2}$ ισχύει:

$$(2)^2+(-1)^2+(-1)^2+(0)^2+(0)^2+(0)^2=6$$

2. Αν *a*≠*β (δ*$_{\alpha\beta}$*=0) τότε* $\sum_{X}\chi_{\alpha}(X)\chi_{\beta}(X)=0$

που σημαίνει ότι το άθροισμα των γινομένων των χαρακτήρων δύο διαφορετικών μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων είναι ίσο με μηδέν. Έτσι, για τις $\boldsymbol{\Gamma}_{\gamma}^{2}$, $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha}^{1}$ ισχύει:

$$(2)(1)+(-1)(1)+(-1)(1)+(0)(1)+(0)(1)+(0)(1)=0$$

Η φυσική σημασία του LOT στο γεγονός ότι *σε έναν διανυσματικό χώρο h διαστάσεων, δύο διανύσματα που ορίζονται με βάση τους χαρακτήρες διαφορετικών μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων είναι ορθογωνικά.*

Στο κεφάλαιο 6 διαπιστώθηκε ότι *οι χαρακτήρες των μητρών εκπροσώπησης διεργασιών συμμετρίας που ανήκουν στην ίδια κλάση είναι ίσοι*, όπως άλλωστε διαπιστώνεται και από τον παραπάνω πίνακα των χαρακτήρων των εκπροσωπήσεων της ομάδας σημείου $\boldsymbol{C_{3v}}$. Η τάξη μιας κλάσης $\boldsymbol{C}$ ορίζεται ως το πλήθος των διεργασιών συμμετρίας που την απαρτίζουν και συμβολίζεται ως $g_C$. Επίσης στην παράγραφο 5.6.2 είδαμε ότι όταν σε μια ομάδα υπάρχουν κλάσεις, οι διεργασίες συμμετρίας της μπορούν να γραφούν ομαδοποιημένες σε κλάσεις που συμβολίζονται ως $g_C\boldsymbol{X}$, όπου $g_C$

ο αριθμός των στοιχείων που συνιστούν την κλάση και $\boldsymbol{X}$ είναι η πρώτη διεργασία της κλάσης. Έτσι για παράδειγμα η ομάδα σημείου $\boldsymbol{C_{3v}}$ έχει τρεις κλάσεις με $g_C(\boldsymbol{E})=1$, $g_C(\boldsymbol{C}_3, \boldsymbol{C}_3^2)=2$ και $g_C(\boldsymbol{\sigma}_v, \boldsymbol{\sigma}'_v, \boldsymbol{\sigma}''_v)=3$. Έτσι οι διεργασίες συμμετρίας της μπορούν να γραφούν ως $\boldsymbol{C_{3v}}$ : $\boldsymbol{E}$, $2\boldsymbol{C}_3$, $3\boldsymbol{\sigma}_v$ και ο παραπάνω πίνακας των χαρακτήρων των εκπροσωπήσεων να απλουστευθεί ως εξής:

| $\boldsymbol{C_{3v}}$ | $\boldsymbol{E}$ | $2\boldsymbol{C}_3$ | $3\boldsymbol{\sigma}_v$ |
|---|---|---|---|
| $\boldsymbol{\Gamma}_\alpha^1$ | 1 | 1 | 1 |
| $\boldsymbol{\Gamma}_\beta^1$ | 1 | 1 | -1 |
| $\boldsymbol{\Gamma}_\gamma^2$ | 2 | -1 | 0 |

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι το LOT μπορεί να επαναδιατυπωθεί ώστε το άθροισμα να αφορά πλέον τις κλάσεις των διεργασιών και όχι το σύνολο των διεργασιών, ως εξής:

$$\sum_C g_C \chi_\alpha(C)\chi_\beta(C)^* = h\delta_{\alpha\beta}$$

όπου $\chi_\alpha(C)$ και $\chi_\beta(C)$ είναι οι χαρακτήρες μιας κλάσης $C$ στις δύο μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις χαρακτήρων, $g_C$ είναι η τάξη της κλάσης $C$ και το άθροισμα τρέχει σε όλες τις κλάσεις της ομάδας. Έτσι, για τις μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις χαρακτήρων της ομάδας σημείου $\boldsymbol{C_{3v}}$ το LOT υπαγορεύει ότι:

$a=\beta=1$ $(\delta_{\alpha\beta}=1)$: 1(1)(1)+2(1)(1)+3(1)(1)=6

$a=\beta=2$ $(\delta_{\alpha\beta}=1)$: 1(1)(1)+2(1)(1)+3(-1)(-1)=6

$a=\beta=3$ $(\delta_{\alpha\beta}=1)$: 1(2)(2)+2(-1)(-1)+3(0)(0)=6

$a=1, \beta=2$ $(\delta_{\alpha\beta}=0)$: 1(1)(1)+2(1)(1)+3(1)(-1)=0

$a=1, \beta=3$ $(\delta_{\alpha\beta}=0)$: 1(1)(2)+2(1)(-1)+3(1)(0)=0

$a=2, \beta=3$ $(\delta_{\alpha\beta}=0)$: 1(1)(2)+2(1)(1)+3(-1)(0)=0

Τέλος, από το μεγάλο και το μικρό θεώρημα της ορθογωνικότητας προκύπτουν οι παρακάτω χρήσιμοι κανόνες:

1. *Το άθροισμα των τετραγώνων των διαστάσεων όλων των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων μιας ομάδας σημείου είναι ίσο με την τάξη της ομάδας.*

   Πράγματι για τις διαστάσεις των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων $\boldsymbol{\Gamma}_\alpha^1$, $\boldsymbol{\Gamma}_\beta^1$ και $\boldsymbol{\Gamma}_\gamma^2$ της $\mathbf{C_{3v}}$ ισχύει: $1^2+1^2+2^2=6$.

2. *Το πλήθος των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων μιας ομάδας σημείου είναι ίσο με το πλήθος των κλάσεων της ομάδας.*

   Πράγματι η ομάδα $\mathbf{C_{3v}}$ έχει τρεις κλάσεις και συνεπώς τρεις μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις

3. *Οι χαρακτήρες των εκπροσωπήσεων των διεργασιών συμμετρίας που ανήκουν στην ίδια κλάση είναι ίσοι.*
4. *Το άθροισμα των τετραγώνων των χαρακτήρων μιας μη αναγώγιμης εκπροσώπησης είναι ίσο με την τάξη της ομάδας $h$.*
5. *Το άθροισμα των γινομένων των χαρακτήρων διαφορετικών μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων είναι ίσο με μηδέν.*

## 7.3 Πίνακες χαρακτήρων

Όπως είδαμε σύμφωνα με το GOT για κάθε αφηρημένη ομάδα ή ομάδα σημείου υπάρχει ένα πεπερασμένο πλήθος μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων ίσο με τον αριθμό των κλάσεων της ομάδας. Οι μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις των ομάδων σημείου καλούνται *βασικά πρότυπα συμμετρίας* (ΒΠΣ) ή *συμμετρικά είδη* της ομάδας και έχουν εξαιρετική σημασία καθόσον είναι το εργαλείο για την εφαρμογή της μοριακής συμμετρίας στην κβαντική χημεία και στη χημεία γενικότερα. Συγκεκριμένα κάθε ιδιότητα ενός μορίου συμπεριφέρεται συμμετρικά όπως ένα από τα ΒΠΣ της ομάδας σημείου στην οποία ανήκει.

Το σύνολο των ιδιοτήτων μιας ομάδα σημείου, όπως οι διεργασίες που περιέχει, οι κλάσεις της, οι χαρακτήρες των βασικών προτύπων συμμετρίας της, κ.α. περιέχονται σε ένα πίνακα που καλείται *πίνακας χαρακτήρων* της ομάδας. Οι πίνακες χαρακτήρων για όλες τις ομάδες είναι γνωστοί. Ο πίνακας χαρακτήρων μιας ομάδα σημείου αποτελεί το μοναδικό εργαλείο που απαιτείται για να εξαχθούν όλες οι πληροφορίες των εξαρτώμενων από τη συμμετρία φυσικοχημικών ιδιοτήτων κάθε μορίου που ανήκει στη συγκεκριμένη ομάδα σημείου.

Κάθε πίνακας χαρακτήρων, όπως αυτός της ομάδας σημείου $\mathbf{C_{3v}}$ που δίνεται στη συνέχεια, έχει καθορισμένη δομή και αποτελείται από τέσσερις περιοχές I, II, III και IV.

| $\boldsymbol{C_{3v}}$ | $\boldsymbol{E}$ | $2\boldsymbol{C}_3$ | $3\boldsymbol{\sigma}_v$ | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $\boldsymbol{A}_1$ | 1 | 1 | 1 | $z$ | $x^2+y^2$, $z^2$ |
| $\boldsymbol{A}_2$ | 1 | 1 | -1 | $\boldsymbol{R}_z$ | |
| $\boldsymbol{E}$ | 2 | -1 | 0 | $(x, y)$, $(\boldsymbol{R}_x, \boldsymbol{R}_y)$ | $(x^2-y^2, xy)$, $(xz, yz)$ |
| II | I | | | III | IV |

Στην πρώτη σειρά της περιοχής II (άνω αριστερό άκρο του πίνακα) αναγράφεται ο συμβολισμός της ομάδας σημείου κατά Schoenflies. Στην πρώτη σειρά της περιοχής I αναγράφονται οι διεργασίες συμμετρίας της ομάδας σημείου ομαδοποιημένες κατά κλάσεις. Έτσι το πλήθος των στηλών της περιοχής I είναι ίσο με το πλήθος των κλάσεων. Τα περιεχόμενα των τεσσάρων περιοχών του πίνακα περιγράφονται αναλυτικότερα στη συνέχεια.

**Περιοχή I**

Η περιοχή I αποτελεί έναν πίνακα με τους χαρακτήρες όλων των βασικών προτύπων συμμετρίας της ομάδας σημείου. Συγκεκριμένα, κάθε σειρά περιέχει τους χαρακτήρες μιας μη αναγώγιμης εκπροσώπησης της ομάδας σημείου που μελετάται (ΒΠΣ), που αντιστοιχούν σε κάθε κλάση της ομάδας. Επειδή το πλήθος των ΒΠΣ (σειρών) είναι ίσο με το πλήθος των κλάσεων (στήλες) ο πίνακας είναι τετραγωνικός. Προφανώς οι χαρακτήρες των ΒΠΣ είναι σύμφωνοι με το LOT.

**Περιοχή II**

Κάθε σειρά της περιοχής II εκτός της πρώτης περιέχει τους συμβολισμούς των ΒΠΣ. Τα σύμβολα που χρησιμοποιούνται προτάθηκαν από τον R.S. Mulliken και είναι δηλωτικά της διάστασης κάθε ΒΠΣ και των τιμών των χαρακτήρων του ΒΠΣ που αντιστοιχούν σε βασικές διεργασίες συμμετρίας της ομάδας. Η έννοια των συμβόλων Mulliken είναι η παρακάτω:

1. Όλα τα μονοδιάστατα ΒΠΣ των *πεπερασμένων* ομάδων σημείου συμβολίζονται ως $\boldsymbol{A}$ ή $\boldsymbol{B}$, τα δισδιάστατα ή *διπλά εκφυλισμένα* ως $\boldsymbol{E}$ και τα τρισδιάστατα ή *τριπλά εκφυλισμένα* ως $\boldsymbol{T}$.[*] Αυτό σημαίνει ότι ο χαρακτήρας της ταυτότητας, $\boldsymbol{E}$, ενός ΒΠΣ που συμβολίζεται ως $\boldsymbol{A}$ ή $\boldsymbol{B}$ θα είναι 1, ενώ αν συμβολίζεται $\boldsymbol{E}$ ή $\boldsymbol{T}$ θα είναι 2 ή 3 αντιστοίχως. Στις ομάδες άπειρης τάξης $\boldsymbol{C_{\infty v}}$ και $\boldsymbol{D_{\infty v}}$ τα μονοδιάστατα ΒΠΣ συμβολίζονται ως $\boldsymbol{\Sigma}$, τα δισδιάστατα ως $\boldsymbol{\Pi}$, τα τρισδιάστατα ως $\boldsymbol{\Delta}$ και τα τετραδιάστατα ως $\boldsymbol{\Phi}$,[**] ενώ ειδικά στην περίπτωση της $\boldsymbol{C_{\infty v}}$ συνήθως εμφανίζονται και οι δύο συμβολισμοί.
2. Τα μονοδιάστατα ΒΠΣ που είναι συμμετρικά ως προς τον κύριο άξονα περιστροφής της ομάδας συμβολίζονται ως $\boldsymbol{A}$, ενώ αν είναι αντισυμμετρικά ως $\boldsymbol{B}$. Έτσι, ότι ο χαρακτήρας της διεργασίας περιστροφής $\boldsymbol{C}_n$ ενός ΒΠΣ που συμβολίζεται ως $\boldsymbol{A}$ ή $\boldsymbol{B}$ (και) θα είναι $\chi(\boldsymbol{C}_n)=+1$ ή $\chi(\boldsymbol{C}_n)=-1$ αντιστοίχως. Αυτό σημαίνει ότι, μια ιδιότητα ενός μορίου που μετασχηματίζεται ως ένα ΒΠΣ $\boldsymbol{A}$ (αποτελεί βάση για την αναγώγιμη εκπροσώπηση $\boldsymbol{A}$) θα διατηρεί το πρόσημό της μετά την επίδραση του $\boldsymbol{C}_n$, ενώ αν μετασχηματίζεται ως ένα ΒΠΣ $\boldsymbol{B}$ θα αλλάζει το πρόσημό της. Στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{D_2}$ και $\boldsymbol{D_{2h}}$ που υπάρχουν τρεις διεργασίες περιστροφής $\boldsymbol{C}_2(x)$, $\boldsymbol{C}_2(y)$ και $\boldsymbol{C}_2(z)$, η κάθε μία από τις οποίες αποτελεί κλάση ως $\boldsymbol{A}$ συμβολίζονται τα ΒΠΣ που είναι συμμετρικά ως προς και τις τρεις

[*] Παλαιότερα τα τρισδιάστατα ΒΠΣ συμβολίζονταν ως $\boldsymbol{F}$.

[**] Οι συμβολισμοί $\boldsymbol{\Sigma}$, $\boldsymbol{\Pi}$, $\boldsymbol{\Delta}$ και $\boldsymbol{\Phi}$ καθώς και οι εκθέτες “+” και “-” προέρχονται από τις πρώτες φασματοσκοπικές μελέτες.

διεργασίες περιστροφής [$\chi(\boldsymbol{C}_n(x))=\chi(\boldsymbol{C}_n(y))=\chi(\boldsymbol{C}_n(z))=+1$], ενώ ως $\boldsymbol{B}$ τα ΒΠΣ που είναι αντισυμμετρικά έστω και σε μία από αυτές [$\chi(\boldsymbol{C}_n(x))$ ή $\chi(\boldsymbol{C}_n(y))$ ή $\chi(\boldsymbol{C}_n(z))=-1$]. Στις μη περιστροφικές ομάδες σημείου $\boldsymbol{C}_1$, $\boldsymbol{C}_s$ και $\boldsymbol{C}_i$ που στερούνται κύριου άξονα όλα τα ΒΠΣ συμβολίζονται ως $\boldsymbol{A}$, αφού έχουν χαρακτήρα +1 για τη διεργασία $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{C}_1$.

3. Στις ομάδες σημείου που περιέχουν τη διεργασία αναστροφής ως προς κέντρο, $\boldsymbol{i}$, χρησιμοποιούνται οι δείκτες "g" (gerade=άρτιος) ή "u" (ungerade=περιττός) για τα ΒΠΣ που είναι συμμετρικά ($\chi(\boldsymbol{i})=+1$) ή αντισυμμετρικά ($\chi(\boldsymbol{i})=-1$) ως προς τη διεργασία $\boldsymbol{i}$.
4. Στις ομάδες σημείου που περιέχουν τη διεργασία κατοπτρισμού, $\boldsymbol{\sigma}_h$, αλλά όχι τη διεργασία αναστροφής, $\boldsymbol{i}$, (π.χ. $\boldsymbol{C}_{nh}$ και $\boldsymbol{D}_{nh}$ με n: περιττό) χρησιμοποιείται απλός, ', ή διπλός, '', τόνος για τα ΒΠΣ που είναι συμμετρικά ($\chi(\boldsymbol{\sigma}_h)=+1$) ή αντισυμμετρικά ($\chi(\boldsymbol{\sigma}_h)=-1$) ως προς τη διεργασία $\boldsymbol{\sigma}_h$. Στις ομάδες που δεν έχουν άξονα οι ίδιοι δείκτες χρησιμοποιούνται για να δηλώσουν συμμετρική ($\chi(\boldsymbol{\sigma}_v)=+1$) ή αντισυμμετρική ($\chi(\boldsymbol{\sigma}_v)=-1$) συμπεριφορά ως προς τη διεργασία $\boldsymbol{\sigma}_v$.
5. Στις ομάδες σημείου που περιέχουν άξονα $C_2$ κάθετο στον κύριο άξονα, $C_2 \perp C_n$, χρησιμοποιούνται οι δείκτες "1" ή "2" για τα ΒΠΣ που είναι συμμετρικά ($\chi(\boldsymbol{C}_2)=+1$) ή αντισυμμετρικά ($\chi(\boldsymbol{C}_2)=-1$) ως προς τη διεργασία $\boldsymbol{C}_2$. Στις ομάδες που δεν έχουν άξονα οι ίδιοι δείκτες χρησιμοποιούνται για να δηλώσουν συμμετρική ($\chi(\boldsymbol{\sigma}_v)=+1$) ή αντισυμμετρική ($\chi(\boldsymbol{\sigma}_v)=-1$) συμπεριφορά ως προς τη διεργασία $\boldsymbol{\sigma}_v$. Ειδικά στις ομάδες σημείου $\boldsymbol{C}_{\infty v}$ και $\boldsymbol{D}_{\infty v}$ χρησιμοποιούνται οι εκθέτες "+" ή "-" αντί των δεικτών "1" και "2" με την ίδια σημασία.
6. Σε αρκετές ομάδες σημείου δείκτες όπως "1" , "2", "3", … χρησιμοποιούνται απλά και μόνο για την αρίθμηση και διάκριση του συμβόλου των ΒΠΣ που δεν μπορούν να διαφοροποιηθούν με βάση τους παραπάνω κανόνες.

Το πρώτο ΒΠΣ στον πίνακα χαρακτήρων οποιασδήποτε ομάδας σημείου έχει όλους του χαρακτήρες ίσους με +1 και αποτελεί το *ολικά συμμετρικό βασικό πρότυπο συμμετρίας* (ΟΣΒΠΣ) της ομάδας. Το ΟΣΒΠΣ κάθε ομάδας έχει εξαιρετική σημασία διότι κάθε ιδιότητα ενός μορίου που ανήκει στην ομάδα και μετασχηματίζεται ως το ΟΣΒΠΣ δε θα μεταβάλλεται υπό την επίδραση οποιασδήποτε διεργασίας της ομάδας. Το μόριο αυτό καθ' εαυτό ανήκει ή φέρει το ΟΣΒΠΣ της ομάδας στην οποία ανήκει αφού παραμένει αμετάβλητο υπό την επίδραση όλων των διεργασιών συμμετρίας της ομάδας σημείου. Με βάση τα παραπάνω το ΟΣΒΠΣ ανάλογα με την ομάδα συμβολίζεται ως $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{A}_1$, $\boldsymbol{A}'$, $\boldsymbol{A}'_1$, $\boldsymbol{A}_g$, $\boldsymbol{A}_{1g}$, $\boldsymbol{\Sigma}$, ή $\boldsymbol{\Sigma}_g^+$.

**Περιοχή ΙΙΙ**

Στην περιοχή ΙΙΙ περιέχονται οι καρτεσιανές συντεταγμένες $x, y, z$ και οι περιστροφές περί του τρεις άξονες, $\boldsymbol{R}_x$, $\boldsymbol{R}_y$, $\boldsymbol{R}_z$. Η ύπαρξη ενός από τα $x, y$ ή $z$ στη σειρά του πίνακα χαρακτήρων που αντιστοιχεί σε ένα συγκεκριμένο ΒΠΣ δηλώνει ότι η αντίστοιχη συνάρτηση $f(x, y, z) = x, y$ ή $z$ μετασχηματίζεται υπό την επίδραση των διεργασιών συμμετρίας της ομάδας όπως το συγκεκριμένο ΒΠΣ, δηλαδή αποτελεί βάση για τη συγκεκριμένη μη αναγώγιμη εκπροσώπηση. Η ύπαρξη ενός από τα $\boldsymbol{R}_x$, $\boldsymbol{R}_y$ ή $\boldsymbol{R}_z$ στη ίδια σειρά με ένα ΒΠΣ δηλώνει ότι η περιστροφή του μορίου περί τον αντίστοιχο άξονα μετασχηματίζεται υπό την επίδραση των διεργασιών συμμετρίας της ομάδας όπως το συγκεκριμένο ΒΠΣ, δηλαδή ότι αποτελεί βάση για τη συγκεκριμένη μη αναγώγιμη εκπροσώπηση. Σε πολλές ομάδες σημείου εμφανίζονται τα ζεύγη $(x, y)$ και $(\boldsymbol{R}_x, \boldsymbol{R}_y)$ στη σειρά ενός δισδιάστατου ΒΠΣ. Αυτό σημαίνει ότι ενώ κάθε ένα από αυτά τα στοιχεία ξεχωριστά $x, y$ **ή** $\boldsymbol{R}_x$, $\boldsymbol{R}_y$ δεν αποτελούν βάση για μια μη αναγώγιμη εκπροσώπηση, τα ζεύγη των στοιχείων αποτελούν βάση για μια δισδιάστατη μη αναγώγιμη εκπροσώπηση. *Τα ΒΠΣ των $x, y, z$ είναι και τα ΒΠΣ των μεταφορικών κινήσεων του μορίου κατά τους τρεις άξονες, $\boldsymbol{T}_x$, $\boldsymbol{T}_y$* και *$\boldsymbol{T}_z$*. Επίσης, *τα ΒΠΣ των $x, y, z$ είναι και τα βασικά πρότυπα συμμετρίας των ατομικών τροχιακών $p_x$, $p_y$, $p_z$ ενός ατόμου που βρίσκεται στο κέντρο μάζας του μορίου* και συνεπώς στην αρχή του συστήματος συντεταγμένων. Τέλος, *το ΒΠΣ του τροχιακού s είναι πάντα το ΟΣΒΠΣ* της ομάδας.

**Περιοχή IV**

Στην περιοχή IV περιέχονται τα έξι δυαδικά γινόμενα των καρτεσιανών συντεταγμένων $x^2, y^2, z^2, xz, yz, xy$. Η ύπαρξη ενός από αυτά στη σειρά ενός ΒΠΣ δηλώνει ότι η αντίστοιχη συνάρτηση $f(x, y, z)=x^2, y^2, z^2, xz, yz$ ή $xy$ μετασχηματίζεται υπό την επίδραση των διεργασιών συμμετρίας της ομάδας όπως το συγκεκριμένο ΒΠΣ, δηλαδή ότι αποτελεί βάση για τη συγκεκριμένη μη αναγώγιμη εκπροσώπηση. Σε πολλές ομάδες σημείου δεν εμφανίζονται τα $x^2$, $y^2$ αλλά τα $x^2$-$y^2$, $x^2$+$y^2$ γιατί οι συναρτήσεις $x^2$ και $y^2$ δεν αποτελούν βάση για μη αναγώγιμη εκπροσώπηση σε αντίθεση με τις $x^2$-$y^2$ και $x^2$+$y^2$. Επίσης συνήθως εμφανίζονται τα ζεύγη ($xz$, $yz$) και ($x^2$-$y^2$, $xz$) στη σειρά ενός δισδιάστατου ΒΠΣ. Αυτό σημαίνει ότι ενώ κάθε ένα από αυτά τα στοιχεία $xz$, $yz$, $x^2$-$y^2$, $xz$ δεν αποτελεί βάση για μη αναγώγιμη εκπροσώπηση, τα συγκεκριμένα ζεύγη των στοιχείων αποτελούν βάση για μια δισδιάστατη μη αναγώγιμη εκπροσώπηση. *Τα ΒΠΣ των* $z^2$, ($x^2$, $y^2$) ή ($x^2$-$y^2$), $xz$, $yz$, $xy$ *είναι και τα βασικά πρότυπα συμμετρίας των ατομικών τροχιακών* $d_{z2}$, $d_{x2\text{-}y2}$, $d_{xz}$, $d_{yz}$, $d_{xy}$ *ενός ατόμου που βρίσκεται στο κέντρο μάζας του μορίου* και συνεπώς την αρχή του συστήματος συντεταγμένων. Επισημαίνεται ότι στις ομάδες σημείου που περιέχουν την αναστροφή ως προς κέντρο, ***i***, οι συναρτήσεις $x$, $y$ ή $z$ ανήκουν σε ΒΠΣ αντισυμμετρικά ως προς το ***i*** (ungerade), ενώ οι συναρτήσεις $x^2$, $y^2$, $z^2$, $xz$, $yz$, $xy$ σε ΒΠΣ συμμετρικά ως προς το ***i*** (gerade). Αυτό σημαίνει ότι *στις κεντροσυμμετρικές ομάδες οι καρτεσιανές συντεταγμένες και τα δυαδικά τους γινόμενα αποκλείεται να ανήκουν στο ίδιο ΒΠΣ.*

**Σύνοψη**

1. Η δομή και οι ιδιότητες των μητρών που συνιστούν αυτές τις μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις διέπονται από το *μεγάλο θεώρημα της ορθογωνικότητας*.
2. Οι ιδιότητες των χαρακτήρων των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων διέπονται από το *μικρό θεώρημα της ορθογωνικότητας*.
3. Σε έναν διανυσματικό χώρο *h* διαστάσεων δύο διανύσματα που αποτελούν βάση για διαφορετικές μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις μιας ομάδας σημείου με τάξη *h* είναι ορθογωνικά ή δύο διανύσματα που ορίζονται με βάση τους χαρακτήρες διαφορετικών εκπροσωπήσεων είναι ορθογωνικά.
4. Το άθροισμα των τετραγώνων των διαστάσεων όλων των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων μιας ομάδας σημείου είναι ίσο με την τάξη της ομάδας.
5. Το πλήθος των μη αναγώγιμων εκπροσωπήσεων μιας ομάδας σημείου είναι ίσο με το πλήθος των κλάσεων της ομάδας.
6. Οι χαρακτήρες μιας εκπροσώπησης διεργασιών συμμετρίας που ανήκουν στην ίδια κλάση είναι ίσοι.
7. Το άθροισμα των τετραγώνων των χαρακτήρων μιας αναγώγιμης εκπροσώπησης είναι ίσο με την τάξη της ομάδας.
8. Οι μη αναγώγιμες εκπροσωπήσεις των ομάδων σημείου καλούνται *βασικά πρότυπα συμμετρίας* (ΒΠΣ) ή *συμμετρικά είδη* της ομάδας.
9. Το σύνολο των ιδιοτήτων μιας ομάδα σημείου, όπως οι διεργασίες που περιέχει, οι κλάσεις της, οι χαρακτήρες των βασικών προτύπων συμμετρίας της, κ.α. περιέχονται σε ένα πίνακα που καλείται *πίνακας χαρακτήρων* της ομάδας.
10. Τα ΒΠΣ συμβολίζονται με σύμβολα που είναι δηλωτικά της διάστασης κάθε ΒΠΣ και των τιμών των χαρακτήρων του ΒΠΣ που αντιστοιχούν σε βασικές διεργασίες συμμετρίας της ομάδας.
11. Στους πίνακες χαρακτήρων μιας ομάδας σημείου φαίνονται τα ΒΠΣ στα οποία ανήκουν οι καρτεσιανές συντεταγμένες, τα δυαδικά τους γινόμενα, οι μεταφορικές και περιστροφικές κινήσεις ως προς τους τρεις άξονες και όλα τα ατομικά τροχιακά *s*, *p* και *d* ενός ατόμου στο κέντρο μάζας του μορίου ή στην αρχή των συντεταγμένων.