

# Una aplicación de la teoría de representaciones en química

Castillo Ramírez, Alonso<sup>1</sup>,

Departamento de Matemáticas, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías,  
Universidad de Guadalajara.

<sup>1</sup>alonso.castillor@academicos.udg.mx

Diamanti, Aikaterini<sup>2</sup>,

Departamento de Química, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías,  
Universidad de Guadalajara.

<sup>1</sup>aikaterini.diamanti@academicos.udg.mx

## Resumen

*La teoría de representaciones lineales consiste en estudiar grupos abstractos a través de sus representaciones como grupos de matrices. En este artículo, presentamos una aplicación de esta teoría en química, específicamente en la aproximación de las frecuencias vibracionales de una molécula usando las representaciones del grupo de simetrías de dicha molécula. Para explicar el procedimiento, primero presentamos la definición del grupo de simetrías de una molécula, describimos cómo obtener la aproximación de las frecuencias vibracionales mediante un sistema lineal de ecuaciones diferenciales, y revisamos los conceptos básicos de la teoría de representaciones lineales. Esperamos que este texto sea útil tanto para químicos interesados en los fundamentos matemáticos del campo de la simetría molecular, como para matemáticos interesados conocer aplicaciones de las matemáticas en otras ciencias.*

**Palabras Clave:** Grupo de simetrías; representación lineal; tabla de caracteres; vibración molecular.

DOI: 10.36788/sah.v8i2.154

Recibido: 17 de junio de 2024

Aceptado: 31 de octubre de 2024

## Introducción

La *teoría de representaciones* es un área de las matemáticas que se encarga de estudiar objetos algebraicos abstractos a través de sus representaciones como objetos matemáticos más concretos. Por ejemplo, una *representación lineal* de un grupo abstracto  $G$  busca identificar a los elementos de  $G$  con matrices cuadradas invertibles con entradas en un campo, mientras que una *representación permutacional* de  $G$  busca identificar a los elementos de  $G$  con permutaciones, o biyecciones, de un conjunto. La idea clave detrás de esta teoría es que

trabajar con objetos más concretos y conocidos, como matrices o permutaciones, en lugar de con objetos más abstractos, permite simplificar cálculos y observaciones.

Más formalmente, una *representación lineal* de un grupo  $G$  es un homomorfismo

$$\rho : G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{F}),$$

donde  $\mathbb{F}$  es un campo (como el campo de los números reales  $\mathbb{R}$ , o el campo de los números complejos  $\mathbb{C}$ ),  $n$  es un número entero positivo llamado el *grado* de la representación, y  $\text{GL}_n(\mathbb{F})$  denota al *grupo general lineal de grado  $n$  sobre  $\mathbb{F}$* , que consiste en todas las matrices invertibles de  $n \times n$  con entradas en  $\mathbb{F}$  equipadas con la multiplicación de matrices. La condición de que  $\rho$  sea homomorfismo implica que la operación del grupo  $G$  será compatible con la multiplicación de matrices en el sentido que

$$\rho(gh) = \rho(g)\rho(h), \quad \forall g, h \in G.$$

En general, será más sencillo trabajar con una representación mientras más pequeño sea su grado (pues es mucho más sencillo multiplicar dos matrices de  $2 \times 2$  que dos matrices de  $15 \times 15$ ). Cuando el grupo  $G$  es finito y el campo  $\mathbb{F}$  es el campo de los números complejos  $\mathbb{C}$ , siempre es posible descomponer cualquier representación de  $G$  en *subrepresentaciones irreducibles* de grados generalmente más pequeños (James and Liebeck, 2004, Teorema 8.7). Por lo tanto, clasificar y entender todas las representaciones irreducibles de un grupo finito  $G$  es uno de los objetivos más abiciosos de la teoría de representaciones. En tal caso, la *tabla de caracteres* de  $G$  registra las trazas de las matrices asociadas a todas las representaciones irreducibles de  $G$ , lo cual resulta ser información esencial para encontrar la descomposición de una representación en sus subrepresentaciones irreducibles.

En este texto, además de presentar una breve introducción a la teoría de representaciones lineales, nos enfocamos en una aplicación en el estudio de las vibraciones de una molécula. En química, una *molécula* consiste en una colección de átomos unidos entre sí por enlaces químicos. Por ejemplo, la molécula del agua consiste en dos átomos de hidrógeno  $H$  y un átomo de oxígeno  $O$  enlazados como lo muestra la Figura 1.

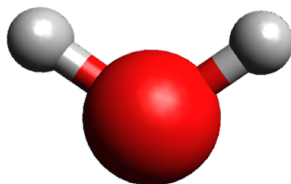


Figura 1: Molécula del agua  $H_2O$ .

Todas las moléculas, a cualquier temperatura, incluso si estuvieran al cero absoluto, se encuentran en constante vibración. Este fenómeno, el cual se debe a las fuerzas internas que

emanan de la interacción entre los átomos de la molécula, está maravillosamente explicado, a manera de divulgación, en (Tivony, 2016). Es posible calcular una aproximación de las frecuencias vibracionales de una molécula usando mecánica newtoniana, mediante un sistema lineal de ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden. La matriz de coeficientes  $A$  de este sistema de ecuaciones depende de las fuerzas internas de la molécula. Como es usual en este tipo de problemas, las soluciones del sistema de ecuaciones pueden describirse en términos de los valores propios de la matriz  $A$ , y es aquí donde la teoría de representaciones hace su aparición.

Toda molécula  $M$  tiene asociado un grupo de simetrías  $\text{Aut}(M)$ , el cual contiene a todas las transformaciones del espacio que dejan invariante a la molécula  $M$ . Resulta que es posible definir una representación lineal de  $\text{Aut}(M)$  sobre el espacio  $\mathbb{R}^{3n}$  de vibraciones de la molécula (donde  $n$  es el número de átomos de  $M$ ) y resulta que la matriz  $A$  de fuerzas internas conmuta con esta representación<sup>1</sup> (James and Liebeck, 2004, Cap. 32). Con ayuda de la tabla de caracteres de  $\text{Aut}(M)$ , el siguiente paso consiste en descomponer esta representación de  $\text{Aut}(M)$  en sus *componentes homogéneas* (que son sumas de subrepresentaciones irreducibles). Con esto, es más sencillo obtener los valores propios de  $A$  cuando la restringimos a los componentes homogéneos, pues son espacios vectoriales de dimensión más baja que  $\mathbb{R}^{3n}$ .

Los grupos de simetría molecular y sus tablas de caracteres son ampliamente estudiados en química, pues no solo ayudan en la aproximación de las frecuencias vibracionales de una molécula, sino que tienen una gran variedad de aplicaciones para predecir o explicar muchas propiedades químicas de la molécula. Esperamos que este texto sea útil tanto para químicos interesados en los fundamentos matemáticos del campo de la simetría molecular, como para matemáticos interesados conocer aplicaciones las matemáticas en otras ciencias. Asumimos que el lector está familiarizado con conceptos básicos de álgebra lineal y ecuaciones diferenciales.

La estructura de este artículo es la siguiente. En la Sección 2, formalizamos el concepto de grupo de simetrías de una molécula a través de transformaciones ortogonales de  $\mathbb{R}^3$  que preservan la estructura de la molécula. En la Sección 3, ahondamos en los modos de vibración de una molécula y en el sistema de ecuaciones diferenciales que aproxima las frecuencias vibracionales. En la Sección 4, presentamos los conceptos básicos de teoría de representaciones, incluyendo la definición de representación irreducible y de tabla de caracteres. Finalmente, en la Sección 5, aplicamos las técnicas de teoría de representaciones para explicar cómo es posible reducir el problema de aproximar las frecuencias vibracionales de una molécula. A lo largo del artículo, ilustramos cada uno de los conceptos definidos para el caso de la molécula del agua  $H_2O$ .

## Grupos de simetría molecular

En esta sección, revisamos brevemente a los grupos de simetría molecular. Para una introducción más detallada sobre este tema, recomendamos el artículo de divulgación (Castillo-Ramírez and Diamanti, 2023), o el libro (Ladd, 1998) para un estudio más exhaustivo.

---

<sup>1</sup>Formalmente, esto significa que la matriz  $A$  define a un *endomorfismo de la representación*.

Un *grupo*  $G$  es un conjunto equipado con una operación binaria asociativa  $\cdot : G \times G \rightarrow G$  que contiene un *elemento identidad*  $e \in G$  (el cual cumple que  $e \cdot g = g \cdot e = g$ , para toda  $g \in G$ ) y en el que todo elemento  $g \in G$  tiene un *inverso*  $g^{-1} \in G$  (el cual cumple que  $g^{-1} \cdot g = g \cdot g^{-1} = e$ ). Pensamos en una *simetría* de un objeto matemático  $X$  con estructura (la cual puede ser una estructura algebraica, geométrica, topológica, etc.) como una transformación invertible  $\tau : X \rightarrow X$  que preserva dicha estructura. El conjunto de todas las simetrías de  $X$ , denotado por  $\text{Aut}(X)$ , equipado con la composición de funciones, forma un grupo, llamado el *grupo de simetrías* de  $X$ .

Pensamos en una molécula  $M$  como un *grafo* embebido en el espacio euclídeo  $\mathbb{R}^3$ . Los vértices del grafo  $V(M) = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$  son una colección de puntos en  $\mathbb{R}^3$  que representan a los átomos de la molécula. Las aristas del grafo representan los enlaces entre los átomos de  $M$ ; es decir, el conjunto de aristas de  $M$  es

$$E(M) = \{\{a_i, a_j\} : a_i \text{ está enlazado con } a_j \text{ en } M\}.$$

Además, cada vértice de  $M$  tiene una etiqueta, la cual corresponde al tipo de átomo de ese punto. Denotamos por  $\nu(a_i)$  a la etiqueta correspondiente a  $a_i \in V(M)$ . Por ejemplo, si  $M = H_2O$ , entonces

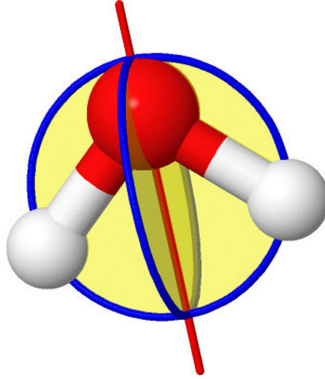
$$V(M) = \{a_1, a_2, a_3\}, \quad E(M) = \{\{a_1, a_3\}, \{a_2, a_3\}\}, \quad \nu(a_1) = \nu(a_2) = H, \quad \nu(a_3) = O.$$

Para considerar al grupo de simetrías de una molécula, es necesario que nuestras transformaciones *preserven distancias* (para no destruir los enlaces entre los átomos) y que *fijen al origen* (para no trasladar a la molécula a otro lugar). El grupo de simetrías de  $\mathbb{R}^3$  que preservan distancias y fijan al origen se le conoce como el *grupo ortogonal real*  $O(3)$ . Debido a que este tipo de transformaciones resultan ser transformaciones lineales de  $\mathbb{R}^3$  (Castillo-Ramírez and Diamanti, 2023, Teorema 3.1), el grupo  $O(3)$  puede representarse como el conjunto de matrices reales de  $3 \times 3$  cuyas filas y columnas son vectores ortonormales.

Para respetar su estructura, las simetrías de una molécula también deben preservar los enlaces de los átomos y las etiquetas; es decir, sólo podemos transformar un vértice de  $M$  en otro si se preservan los enlaces y las etiquetas correspondientes. Explícitamente, el grupo de simetrías de  $M$ , denotado por  $\text{Aut}(M)$ , es el conjunto de todas las transformaciones  $T \in O(3)$  tales que:

1.  $T(a_i) \in V(M)$ , para toda  $a_i \in V(M)$ .
2. Si  $\{a_i, a_j\} \in E(M)$ , entonces  $\{T(a_i), T(a_j)\} \in E(M)$ .
3.  $\nu(T(a_i)) = \nu(a_i)$ , para toda  $a_i \in M$ .

Por ejemplo, la molécula  $M = H_2O$  tiene solo cuatro simetrías posibles: la identidad  $E$ , la simetría denotada por  $\sigma_{yz}$  que representa a la reflexión de  $\mathbb{R}^3$  respecto al plano de la molécula, la simetría  $\sigma_{xz}$  que representa a la reflexión de  $\mathbb{R}^3$  respecto al plano que pasa por el átomo de oxígeno y es perpendicular al plano de la molécula, y simetría denotada por  $C_2$

Figura 2: Simetrías de  $H_2O$ 

que es la rotación de  $180^\circ$  respecto al eje que es la intersección de los dos planos anteriores (ver Figura 2). Es decir,

$$\text{Aut}(H_2O) = \{E, C_2, \sigma_{xy}, \sigma_{yz}\}.$$

Expícitamente, la matrices en  $O(3)$  que definen a los elementos de  $\text{Aut}(H_2O)$  están dadas en la Tabla 1.

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_{yz} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_{xz} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Tabla 1: Matrices que representan las simetrías de  $H_2O$ .

Haciendo todas las posibles multiplicaciones de pares de las matrices anteriores, podemos formar la *tabla de Cayley* del grupo  $\text{Aut}(H_2O)$  (Tabla 2). Con esto, podemos ver que el grupo

$\times$	$E$	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$E$	$E$	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$C_2$	$C_2$	$E$	$\sigma_{yz}$	$\sigma_{xz}$
$\sigma_{xz}$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$	$E$	$C_2$
$\sigma_{yz}$	$\sigma_{yz}$	$\sigma_{xz}$	$C_2$	$E$

Tabla 2: Tabla de Cayley del grupo  $\text{Aut}(H_2O)$ 

$\text{Aut}(H_2O)$  es isomorfo al grupo de Klein  $\mathbb{Z}_2 \oplus \mathbb{Z}_2$ , el cual consiste en el conjunto de pares

$\{(0, 0), (1, 0), (0, 1), (1, 1)\}$  equipado con la suma módulo 2 entrada por entrada (por ejemplo,  $(1, 1) + (1, 0) = (0, 1)$ ).

Existen moléculas cuyos grupos de simetrías son mucho más complejos, como el Buckminsterfullereno  $C_{60}$  (Figura 3), cuyo grupo de simetrías tiene 120 elementos y es isomorfo al grupo simétrico  $S_5$ , o la molécula lineal del dióxido de carbono  $CO_2$  (Figura 4), cuyo grupo de simetrías es infinito, pues es isomorfo al grupo de simetrías de un cilindro ideal (se pueden consultar más detalles en (Castillo-Ramírez and Diamanti, 2023)).

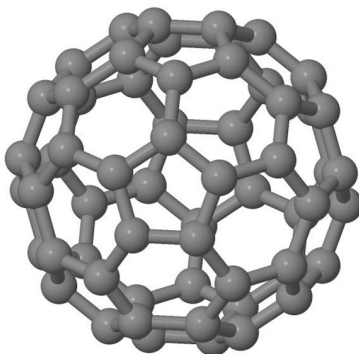


Figura 3: Buckminsterfullereno  $C_{60}$

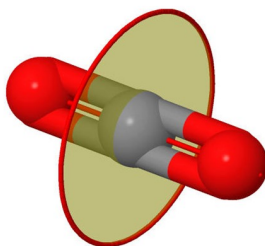


Figura 4: Dióxido de carbono  $CO_2$

## Vibración molecular

Actualmente, se sabe que describir matemáticamente la vibración de una molécula es muy complicado, pues involucra herramientas de mecánica cuántica como la famosa ecuación de Schrödinger. Sin embargo, es posible encontrar una buena aproximación en el cálculo de las frecuencias vibracionales de una molécula usando mecánica newtoniana. En este modelo, se asume que la vibración de un átomo se comporta como un resorte (más precisamente, como un *oscilador armónico simple*), por lo que es posible aplicar la ley de Hooke y la Segunda Ley de Newton.

Supongamos que una molécula tiene  $n$  átomos  $a_1, a_2, \dots, a_n$  que vibran. A cada átomo  $a_i$  lo consideramos como un vector en el espacio  $\mathbb{R}^3$ , por lo que el estado de la molécula en un momento del tiempo  $t$  puede describirse con un vector  $x(t)$  en  $\mathbb{R}^{3n}$ . Pensemos en cada uno de estos vectores en  $\mathbb{R}^{3n}$  como una fotografía de un instante de una molécula que está vibrando. Aplicando la segunda ley de Newton, obtenemos el sistema de ecuaciones diferenciales

$$\frac{d^2x}{dt^2} = Ax, \quad (1)$$

donde  $A$  es una matriz simétrica real de  $3n \times 3n$  cuyas entradas están determinadas por las fuerzas internas de la molécula.

Un *modo normal de vibración* de una molécula es un patrón de movimiento en el que todos los átomos vibran con la misma frecuencia. Por ejemplo, la molécula  $H_2O$  tiene tres modos normales de vibración: estiramiento simétrico, estiramiento asimétrico, y doblamiento (ver Figuras 5, 6 y 7, respectivamente).

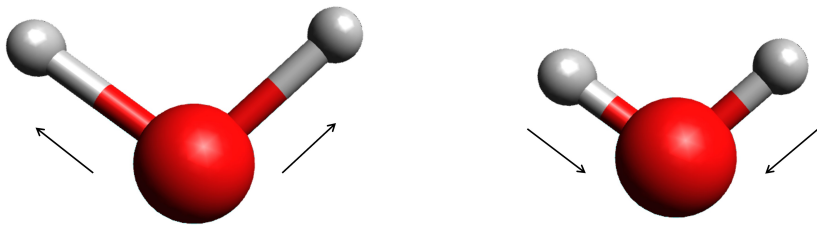


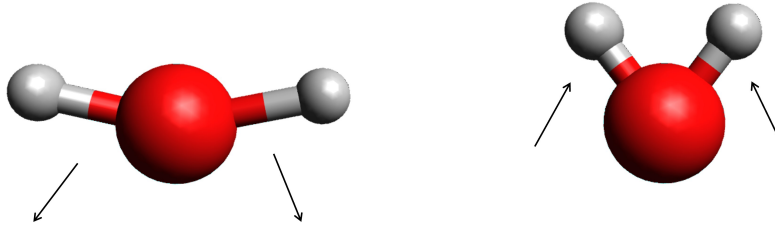
Figura 5: Estiramiento simétrico de  $H_2O$



Figura 6: Estiramiento asimétrico de  $H_2O$

Resulta que toda solución del sistema (1) es una combinación lineal de los modos normales de vibración de la molécula. En general, una molécula no lineal con  $n$  átomos tiene  $3n - 6$  modos normales de vibración, mientras que una molécula lineal con  $n$  átomos tiene  $3n - 5$  modos normales de vibración (Kowolik, 2024).

Es bien conocida la importancia de los valores y vectores propios de una matriz en la solución de sistemas lineales de ecuaciones diferenciales con coeficientes constantes. Recordemos que  $\lambda \in \mathbb{R}$  es un *valor propio* de  $A$  si existe un vector  $v \in \mathbb{R}^{3n}$  distinto de cero (llamado

Figura 7: Doblamiento de  $H_2O$ 

*vector propio*) tal que  $Av = \lambda v$ . Con esto, la solución general un sistema lineal de primer orden

$$\frac{dx}{dt} = Ax, \quad (2)$$

donde la matriz  $A$  tiene  $3n$  vectores propios linealmente independientes, está dada por

$$x(t) = C_1 e^{\lambda_1 t} v_1 + \cdots + C_{3n} e^{\lambda_{3n} t} v_{3n},$$

donde  $C_i$  es una constante arbitraria para cada  $i = 1, 2, \dots, 3n$ , y  $v_1, \dots, v_{3n} \in \mathbb{R}^{3n}$  son vectores propios linealmente independientes correspondientes a valores propios  $\lambda_1, \dots, \lambda_{3n} \in \mathbb{R}$ , respectivamente (Zill, 1997, Teorema 8.7).

El sistema (1) es un sistema lineal homogéneo de ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden con coeficientes constantes, pues la matriz de fuerzas internas  $A$  no depende del tiempo  $t$ . Además, al ser una matriz simétrica, todos los valores propios de  $A$  son reales y existen  $3n$  vectores propios linealmente independientes.<sup>2</sup> Por consideraciones físicas, los valores propios de  $A$  no pueden ser positivos (pueden ser 0 o un número real negativo). Como se explica en (James and Liebeck, 2004, p. 373), es posible demostrar que las soluciones del sistema (1) están dadas por

$$x(t) = C_1 \sin(\sqrt{-\lambda_1} t + K_1) v_1 + \cdots + C_{3n} \sin(\sqrt{-\lambda_{3n}} t + K_{3n}) v_{3n},$$

donde  $C_i$  y  $K_i$  son constantes arbitrarias para  $i = 1, 2, \dots, 3n$ , y  $v_1, \dots, v_{3n} \in \mathbb{R}^{3n}$  son vectores propios linealmente independientes correspondientes a valores propios  $\lambda_1, \dots, \lambda_{3n} \in \mathbb{R} - \{0\}$ , respectivamente (si  $\lambda_i = 0$  para algún  $i$ , el término correspondiente en la solución anterior debe reemplazarse por  $C_i(t + K_i)v_i$ ).

En vista de lo anterior, el obstáculo principal para resolver el sistema de ecuaciones (1) es encontrar los valores propios de la matriz  $A \in M_{3n \times 3n}(\mathbb{R})$  de fuerzas internas, donde  $n$  es el número de átomos de la molécula. La técnica estándar para encontrar los valores propios de una matriz  $A$  es encontrar las soluciones de la ecuación característica

$$\det(A - zI_{3n}) = 0,$$

donde  $I_{3n} \in M_{3n \times 3n}(\mathbb{R})$  es la matriz identidad. Esto resulta ser una ecuación polinómica de grado  $3n$ , la cual es muy difícil resolver de manera exacta (sin usar métodos numéricos)

<sup>2</sup>Esto puede verse como una consecuencia del Teorema Espectral (Axler, 1997, Teorema 7.29)



cuando  $n$  es grande. Por ejemplo, el *Buckminsterfullereno* es una molécula con  $n = 60$  átomos de carbono, por lo que encontrar los valores propios de su matriz de fuerzas internas implica resolver una ecuación polinómica de grado  $3 \times 60 = 180$ .

Afortunadamente, el cálculo de los valores y vectores propios de la matriz  $A$  puede simplificarse considerablemente usando los *caracteres* del grupo de simetrías de la molécula.

## Teoría de representaciones

En esta sección, revisamos algunos de los conceptos fundamentales de la teoría clásica de representaciones de grupos finitos. Una exposición mucho más completa de estos temas puede consultarse en (James and Liebeck, 2004).

El *grupo general lineal*  $\text{GL}_n(\mathbb{F})$  es el conjunto de todas las matrices invertibles de  $n \times n$  con entradas en un campo  $\mathbb{F}$ , equipado con la multiplicación usual de matrices. Recordemos que existe un isomorfismo entre  $\text{GL}_n(\mathbb{F})$  y el grupo de transformaciones lineales invertibles del espacio vectorial  $\mathbb{F}^n$ . Por lo tanto, siempre podemos identificar a una matriz  $T \in \text{GL}_n(\mathbb{F})$  con su respectiva transformación lineal invertible.

Dado cualquier grupo  $G$ , una *representación de grado  $n$*  de  $G$  es una función  $\rho : G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{F})$  tal que

$$\rho(gh) = \rho(g)\rho(h), \quad \forall g, h \in G.$$

En otras palabras, esta función asigna a cada elemento  $g \in G$  una matriz invertible  $\rho(g) \in \text{GL}_n(\mathbb{F})$ , y además, la matriz asociada al producto  $gh$  en  $G$  debe ser igual al producto de las matrices correspondientes  $\rho(g)\rho(h)$ . Esta última propiedad nos dice que la función  $\rho : G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{F})$  es un homomorfismo de grupos.

Intuitivamente, una representación nos permite mirar a un grupo abstracto como un grupo de objetos más familiares: las matrices. En general, una representación será más sencilla mientras menor sea su grado  $n$ .

Dada una representación  $\rho : G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{F})$ , decimos que un subespacio vectorial  $W$  de  $\mathbb{F}^n$  es *invariante* si

$$\rho(g)w \in W, \quad \forall w \in W,$$

donde  $\rho(g)w$  representa la multiplicación de la matriz  $\rho(g)$  por el vector  $w$  (visto como vector columna). El subespacio trivial y todo el espacio  $\mathbb{F}^n$  siempre son invariantes.

**Definición 1 (Representación irreducible)** *Decimos que una representación  $\rho : G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{F})$  es irreducible si no existen subespacios invariantes de  $\mathbb{F}^n$  además del subespacio trivial y de  $\mathbb{F}^n$  mismo.*

A partir de ahora, consideramos que el grupo  $G$  es finito y que el campo  $\mathbb{F}$  es el campo de los números complejos  $\mathbb{C}$ , pues la teoría de representaciones se comporta particularmente bien en esta situación.

**Teorema 1 (Maschke)** *Sean  $G$  un grupo finito y sea  $\rho : G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{C})$  una representación. Para cualquier subespacio invariante  $W \subseteq \mathbb{C}^n$  existe un subespacio invariante  $U \subseteq \mathbb{C}^n$  tal que*

$$\mathbb{C}^n = W \oplus U.$$



El Teorema de Maschke puede demostrarse definiendo un producto interior Hermitiano en  $\mathbb{C}^n$  que sea invariante respecto a la representación  $\rho : G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{C})$ . Con esto, el espacio  $U$  será el complemento ortogonal de  $W$  respecto a este producto interior Hermitiano.

El Teorema de Maschke nos permite demostrar fácilmente, usando inducción, que dada cualquier representación  $\rho : G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{C})$  de un grupo finito  $G$  existen subespacios invariantes irreducibles  $W_1, W_2, \dots, W_r$  de  $\mathbb{C}^n$  tales que

$$\mathbb{C}^n = W_1 \oplus \dots \oplus W_r. \quad (3)$$

Tomando bases para cada uno de estos subespacios  $W_i$ , vemos que, para toda  $g \in G$ , la matriz  $\rho(g) \in \text{GL}_n(\mathbb{C})$  será similar a una matriz diagonal por bloques. Si  $\dim(W_i) = n_i$ , entonces  $W \cong \mathbb{C}^{n_i}$ , y es posible definir una *subrepresentación irreducible*  $\rho_i : G \rightarrow \text{GL}_{n_i}(\mathbb{C})$  donde  $\rho_i(g)$  es igual al  $i$ -ésimo bloque diagonal de la matriz similar a  $\rho(g)$ . Por lo tanto, podemos pensar que las representaciones irreducibles del grupo  $G$  son los bloques constructores de todas las representaciones de  $G$ .

Definimos el *carácter* de una representación  $\rho : G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{C})$  como la función  $\chi_\rho : G \rightarrow \mathbb{C}$  dada por

$$\chi_\rho(g) := \text{Tr}(\rho(g)), \quad \forall g \in G,$$

donde  $\text{Tr}(\rho(g))$  es la traza de la matriz  $\rho(g)$ , es decir, la suma de los elementos de la diagonal. Recordemos que dos elementos de un grupo  $g_1, g_2 \in G$  son *conjugados* si existe  $h \in G$  tal que  $g_1 = hg_2h^{-1}$ . Esto define una relación de equivalencia sobre  $G$ , cuyas clases de equivalencia reciben el nombre de *clases de conjugación*. Un carácter  $\chi_\rho : G \rightarrow \mathbb{C}$  es constante en las clases de conjugación de  $G$  porque si  $g_1 = hg_2h^{-1}$ , entonces

$$\begin{aligned} \chi_\rho(g_1) &= \text{Tr}(\rho(g_1)) \\ &= \text{Tr}(\rho(hg_2h^{-1})) \\ &= \text{Tr}(\rho(h)\rho(g_2)\rho(h)^{-1}) \\ &= \text{Tr}(\rho(h)\rho(h)^{-1}\rho(g_2)) \\ &= \text{Tr}(\rho(g_2)) = \chi_\rho(g_2). \end{aligned}$$

Todo grupo finito  $G$  tiene un número finito de representaciones irreducibles (James and Liebeck, 2004, Corolario 10.7). En tal caso, podemos formar la *tabla de caracteres* de  $G$ , la cual enlista los valores de todos los caracteres irreducibles de  $G$  en cada una de las clases de conjugación de  $G$ . Por ejemplo, consideremos al grupo de simetrías del agua  $\text{Aut}(H_2O)$  discutido en la sección anterior, el cual es isomorfo al grupo de Klein. Como  $\text{Aut}(H_2O)$  es abeliano (es decir, todos sus elementos conmutan), sus clases de conjugación solo contienen un elemento. Resulta que  $\text{Aut}(H_2O)$  tiene cuatro caracteres irreducibles  $\chi_i : \text{Aut}(H_2O) \rightarrow \mathbb{C}$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$ , dados por la Tabla 3 (ver también (Rioux, 2024)).

Una propiedad clave de los caracteres de un grupo es que si una representación es la suma directa de dos subrepresentaciones, entonces el carácter de la representación es igual a la suma de los caracteres de las subrepresentaciones. De esta manera, si una representación  $\rho : G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{C})$  se descompone como la suma directa de subrepresentaciones irreducibles

	$E$	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$\chi_1$	1	1	1	1
$\chi_2$	1	1	-1	-1
$\chi_3$	1	-1	1	-1
$\chi_4$	1	-1	-1	1

Tabla 3: Tabla de caracteres del grupo  $\text{Aut}(H_2O)$ 

$\rho_i : G \rightarrow \text{GL}_{n_i}(\mathbb{C})$ , con  $i = 1, \dots, r$ , como en la ecuación 3, entonces

$$\chi_\rho = \chi_1 + \chi_2 + \dots + \chi_r, \quad (4)$$

donde  $\chi_i := \chi_{\rho_i}$ , para  $i = 1, \dots, r$ . Por lo tanto, determinar los caracteres irreducibles que constituyen al carácter de una representación nos ayuda a describir dicha representación. Esto se puede lograr con ayuda del producto Hermitiano sobre caracteres  $\chi_1, \chi_2 : G \rightarrow \mathbb{C}$  definido por

$$\langle \chi_1, \chi_2 \rangle := \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi_1(g) \overline{\chi_2(g)}, \quad (5)$$

donde  $\overline{\chi_2(g)}$  denota al conjugado complejo de  $\chi_2(g)$ . El matemático alemán Issai Schur demostró en la primera mitad del siglo XX que los caracteres irreducibles de un grupo finito forman una base ortonormal para el espacio de *funciones de clase* de  $G$  (i.e., funciones de la forma  $G \rightarrow \mathbb{C}$  que son constantes en las clases de conjugación de  $G$ ). Esto se traduce a que las filas de la tabla de caracteres de  $G$  son vectores ortonormales.

**Proposición 1** *Sea  $\chi_\rho$  un carácter de un grupo finito  $G$  y sea  $\chi_k$  un carácter irreducible de  $G$ . Entonces,  $\chi_k$  es un constituyente de  $\chi_\rho$  si y solo si  $\langle \chi_\rho, \chi_k \rangle \neq 0$ .*

**Demostración 1** *Como se discutió anteriormente, existen caracteres irreducibles  $\chi_1, \dots, \chi_r : G \rightarrow \mathbb{C}$  tales que la ecuación 4 se cumple. Luego*

$$\begin{aligned} \langle \chi_\rho, \chi_k \rangle &= \langle \chi_1 + \chi_2 + \dots + \chi_r, \chi_k \rangle \\ &= \langle \chi_1, \chi_k \rangle + \langle \chi_2, \chi_k \rangle + \dots + \langle \chi_r, \chi_k \rangle. \end{aligned}$$

*Las relaciones de ortogonalidad de Schur implican que*

$$\langle \chi_i, \chi_k \rangle = \begin{cases} 1 & \text{si } i = k \\ 0 & \text{si } i \neq k. \end{cases}$$

*Por lo tanto,  $\chi_k$  será igual a algunos de los caracteres  $\chi_1, \dots, \chi_r$  si y solo si  $\langle \chi_\rho, \chi_k \rangle \neq 0$  (es posible que el carácter  $\chi_k$  aparezca varias veces en la suma, por lo que  $\langle \chi_\rho, \chi_k \rangle$  será igual al número de veces que  $\chi_k$  aparece en la descomposición de  $\chi_\rho$ ).*

## Representaciones del grupo de simetrías de una molécula

Dada una molécula  $M$ , definimos la representación  $\rho : \text{Aut}(M) \rightarrow \text{GL}_{3n}(\mathbb{R})$  de su grupo de simetrías en el espacio de vibraciones como

$$\rho(T)(a_1, a_2, \dots, a_n) = (Ta_1, Ta_2, \dots, Ta_n), \quad \forall a_i \in \mathbb{R}^3, T \in \text{Aut}(M).$$

Recordando que cada elemento de  $\mathbb{R}^{3n}$  representa una fotografía de la molécula en vibración, esta representación consiste en aplicar las simetrías de  $\text{Aut}(M)$  a cada una de las fotografías.

Por ejemplo, cuando  $M = H_2O$ , la representación  $\rho : \text{Aut}(H_2O) \rightarrow \text{GL}_9(\mathbb{R})$  está dada por

$$\rho(\sigma_{yz}) = \left( \begin{array}{ccc|ccc|ccc} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right)$$

$$\rho(\sigma_{xz}) = \left( \begin{array}{ccc|ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

$$\rho(C_2) = \left( \begin{array}{ccc|ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right).$$

Una explicación detallada de cómo obtener las matrices anteriores puede verse en (IITM, 2021).

Resulta que por razones físicas (James and Liebeck, 2004, Prop. 32.11), la matriz  $A \in M_{3n \times 3n}(\mathbb{R})$  de fuerzas internas de una molécula  $M$  conmuta con la representación de  $\text{Aut}(M)$

en  $\mathbb{R}^{3n}$ , es decir

$$A\rho(T) = \rho(T)A, \quad \forall T \in \text{Aut}(M).$$

Formalmente, el resultado anterior nos dice que la matriz  $A$  define un *endomorfismo de la representación* de  $\text{Aut}(M)$  en  $\mathbb{R}^{3n}$ .

Si  $\chi$  es un carácter irreducible de  $\text{Aut}(M)$ , definimos al *componente homogéneo*  $V_\chi$  como el subespacio invariante de  $\mathbb{R}^{3n}$  que es la suma directa de todos los subespacios irreducibles de  $\mathbb{R}^{3n}$  cuyo carácter es  $\chi$ .

**Proposición 2 (Prop. 32.13 en (James and Liebeck, 2004))** *Los componentes homogéneos  $V_\chi$  de  $\mathbb{R}^{3n}$  son invariantes bajo la matriz de fuerzas internas  $A \in M_{3n \times 3n}(\mathbb{R})$ ; es decir,*

$$Av \in V_\chi, \quad \forall v \in V_\chi.$$

La proposición anterior implica que la acción de la matriz  $A$  puede restringirse a cada uno de los componentes homogéneos  $V_\chi$ , y esta acción puede representarse como una matriz más pequeña  $A_\chi$  de  $k \times k$ , donde  $k$  es la dimensión de  $V_\chi$ . Al estar definida por la restricción, todo valor propio de  $A_\chi$  será también un valor propio de  $A$ . Con esto, podemos reducir el problema de obtener los valores propios de  $A$  en los problemas más sencillos de obtener los valores propios de las matrices  $A_\chi$ .

Por el párrafo anterior, nuestro problema se reduce a encontrar los componentes homogéneos de la representación de  $\text{Aut}(M)$  en  $\mathbb{R}^{3n}$ . En el caso de la molécula del agua, si calculamos la traza de las matrices  $\rho(C_2)$ ,  $\rho(\sigma_{xy})$  y  $\rho(\sigma_{yz})$  dadas anteriormente, podemos obtener los valores del carácter  $\chi_\rho$  asociado con la representación  $\rho : \text{Aut}(H_2O) \rightarrow \text{GL}_9(\mathbb{R})$ :

	$E$	$C_2$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$\chi_\rho$	9	-1	1	3

Para encontrar la descomposición de  $\chi_\rho$ , calculamos el producto Hermitiano (5) de  $\chi_\rho$  con los caracteres irreducibles dados en la Tabla 3.

$$\begin{aligned} \langle \chi_\rho, \chi_1 \rangle &= \frac{1}{4}((9)(1) + (-1)(1) + (1)(1) + (3)(1)) = 3 \\ \langle \chi_\rho, \chi_2 \rangle &= \frac{1}{4}((9)(1) + (-1)(1) + (1)(-1) + (3)(-1)) = 1 \\ \langle \chi_\rho, \chi_3 \rangle &= \frac{1}{4}((9)(1) + (-1)(-1) + (1)(1) + (3)(-1)) = 2 \\ \langle \chi_\rho, \chi_4 \rangle &= \frac{1}{4}((9)(1) + (-1)(-1) + (1)(-1) + (3)(1)) = 3. \end{aligned}$$

Por lo tanto, la descomposición del carácter  $\chi_\rho$  en caracteres irreducibles es

$$\chi_\rho = 3\chi_1 + \chi_2 + 2\chi_3 + 3\chi_4.$$

En otras palabras, la representación de  $\text{Aut}(H_2O)$  en  $\mathbb{R}^9$  tiene tres componentes homogéneos:  $V_{\chi_1}$  de dimensión 3,  $V_{\chi_2}$  de dimensión 1,  $V_{\chi_3}$  de dimensión 2, y  $V_{\chi_4}$  de dimensión 3. Por lo

tanto, el problema de determinar los valores propios de  $A$ , que es una matriz de  $9 \times 9$ , se reduce a determinar los valores propios de dos matrices de  $3 \times 3$ , una matriz de  $2 \times 2$  y una matriz de  $1 \times 1$ .

Escribir de forma explícita las matrices correspondientes a los componentes homogéneos requiere algunas técnicas adicionales de teoría de representaciones, las cuales están descritas en (James and Liebeck, 2004, p. 376–377). Sin embargo, esperamos haber comunicado al lector la estrategia general detrás del uso de la teoría de representaciones para el cálculo de las frecuencias vibracionales de una molécula, y haberlo motivado en aprender más sobre las fascinantes aplicaciones de las matemáticas en la química.

## Conclusión

La teoría de representaciones es una herramienta poderosa que combina elementos de la teoría de grupos con el álgebra lineal. En este artículo presentamos cómo aplicar la teoría de representaciones para resolver el sistema lineal de ecuaciones diferenciales que describe las frecuencias vibracionales de una molécula. En esencia, el método consiste en calcular los componentes homogéneos de la representación del grupo de simetrías de la molécula en el espacio  $\mathbb{R}^{3n}$  de vibraciones. Las restricciones de la acción de la matriz  $A$  de fuerzas internas (que es igual a la matriz de coeficientes del sistema lineal de ecuaciones diferenciales) a cada uno de los componentes homogéneos serán generalmente matrices de dimensiones más pequeñas, lo que nos permite calcular más fácilmente sus valores propios, y con esto resolver el problema de las frecuencias vibracionales de la molécula.

Como posibles continuaciones futuras a este trabajo se encuentran las aplicaciones de la teoría de grupos y la teoría de representaciones en *espectroscopía*, la cual consiste en la interpretación del espectro electromagnético de una molécula, y en *cristalografía*, la cual estudia la estructura y propiedades moleculares de los cristales.

## Agradecimientos

Agradecemos sinceramente al revisor anónimo de este artículo por sus valiosas observaciones.

## Referencias

- Axler, S. (1997). *Linear Algebra Done Right*. Springer Verlag.
- Castillo-Ramírez, A. and Diamanti, A. (2023). Una breve introducción a los grupos de simetría molecular. *Miscelánea Matemática de la Sociedad Matemática Mexicana*, 77:1–15.
- IITM, N.-N. (2021). mod12lec60 - symmetry of normal modes of vibration. YouTube.
- James, G. and Liebeck, M. (2004). *Representations and characters of groups*. Cambridge University Press.
- Kowolik, K. (2024). Normal modes. *LibreTexts Chemistry*.
- Ladd, M. (1998). *Symmetry and group theory in chemistry*. Elsevier.
- Rioux, F. (2024). Group theory principles applied to h2o. *LibreTexts Chemistry*.
- Tivony, R. (2016). The invisible motion of still objects. TED-Ed, YouTube Channel.
- Zill, D. G. (1997). *Ecuaciones diferenciales con aplicaciones de modelado*. International Thomson Editores.

**Como citar este artículo:** A. Castillo Ramírez y A. Diamanti, "Una aplicación de la teoría de representaciones en química", Saharus. Revista Electrónica de Matemáticas, vol. 8, no. 2, pp. 13-27, 2024. <https://10.36788/sah.v8i2.154>.