



"El saber de mis hijos  
hará mi grandeza"

# SahuarUS

Revista electrónica de Matemáticas

Vol. 8  
Número 2

Diciembre 2024 · e-ISSN: 2448-5365



"El saber de mis hijos  
hará mi grandeza"

**Dra. María Rita Plancarte Martínez**

Rectora

**Dr. Ramón Enrique Robles Zepeda**

Secretario General Académico

**Dr. Luis Enrique Riojas Duarte**

Secretario General Administrativo

**Dr. Joel Enrique Espejel Blanco**

Director Administrativo del Campus  
Hermosillo

**Dr. Juan Pablo Soto Barrera**

Coordinador General de la Facultad  
Interdisciplinaria de Ciencias Exactas y  
Naturales

**Dr. Jesús Francisco Espinoza Fierro**

Jefe del Departamento de Matemáticas



### **Editor Responsable**

Dr. Misael Avendaño Camacho

### **Comité Editorial**

Dr. Manuel Adrian Acuña Zegarra

Dra. Carolina Espinoza Villalva

Dra. Carmen Geraldí Higuera Chan

Ing. Aaron Lara Ordoñez

Dra. Gloria Angélica Moreno Durazo

Dr. José Crispín Ruíz Pantaleón

### **Editores Asociados**

Dr. José Luis Cisneros Molina

Instituto de Matemáticas, Unidad Cuernavaca, UNAM

Dr. Xavier Gómez Mont

Centro de Investigaciones en Matemáticas

Dr. Juan Carlos Hernández Gómez

Facultad de Matemáticas, Universidad Autónoma de Guerrero,  
Acapulco, Guerrero

Dr. Fernando Antonio Hitt Espinoza

Universidad de Quebec, Montreal, Canada

Dra. Roxana López Cruz

Facultad de Matemáticas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos,  
Lima, Perú

Dr. Humberto Madrid de la Vega

Centro de Investigación en Matemáticas Aplicadas, Universidad  
Autónoma de Coahuila

Dr. Pedro Miramontes Vidal

Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México

Dr. Carlos Gabriel Pacheco González

Centro de Investigación y de Estudios Avanzados

Dra. Sandra Evely Parada Rico

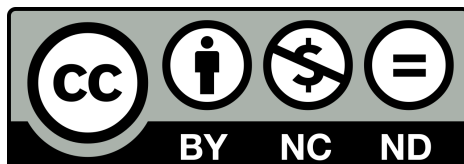
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Dr. José Antonio Vallejo Rodríguez

Universidad Autónoma de San Luis Potosí

SAHUARUS. REVISTA ELECTRÓNICA DE MATEMÁTICAS, volumen 8, número 2, diciembre 2024 - junio 2025, es una publicación semestral, editada por la Universidad de Sonora, a través del Departamento de Matemáticas. Blvd. Luis Encinas y Rosales S/N, colonia Centro, Hermosillo, Sonora, México. C.P. 83000. Tel. (662) 2592155. Página web: [sahuarus.unison.mx](http://sahuarus.unison.mx). Correo electrónico: [sahuarus@unison.mx](mailto:sahuarus@unison.mx). Editor responsable: Misael Avendaño Camacho. Reserva de Derechos al Uso Exclusivo No. **04-2023-032214541100-102**, e-ISSN: 2448-5365, ambos otorgados por el Instituto Nacional de Derechos de Autor.

Los artículos publicados por [Sahuarus. Revista Electrónica de Matemáticas](http://sahuarus.unison.mx) se distribuye bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/), la cual permite la distribución y el uso del material publicado citando la fuente de la que proviene, prohíbe la modificación y el uso con fines comerciales.



# Índice General

Resolviendo ecuaciones polinomiales

Hernán de Alba Casillas & Daniel Duarte . . . . . I - 12

Una aplicación de la teoría de representaciones en química

Alonso Castillo Ramírez & Aikaterini Diamanti . . . . . 13 - 27

# Resolviendo ecuaciones polinomiales

Hernán de Alba Casillas<sup>1</sup> y Daniel Duarte<sup>2</sup>

<sup>1</sup>CONAHCYT-Unidad Académica de Matemáticas de la Universidad Autónoma de Zacatecas

<sup>2</sup>Centro de Ciencias Matemáticas, UNAM Campus Morelia

<sup>1</sup>halba@uaz.edu.mx, <sup>2</sup>adduarte@matmor.unam.mx

## Resumen

*En este artículo exploramos un método de resolución de ecuaciones polinomiales que tienen una cantidad finita de soluciones. El algoritmo para solucionar estas ecuaciones es similar al método de eliminación de Gauss en el sentido de que también convierte el sistema de ecuaciones original en otro que tiene forma escalonada. El algoritmo en cuestión está basado en un algoritmo de la división para polinomios en varias variables así como un algoritmo que permite eliminar términos especiales de un polinomio. Para concluir, comentamos algunas aplicaciones de los conceptos que aparecen en este artículo.*

**Palabras Clave:** Sistemas de ecuaciones polinomiales, algoritmo de la división, algoritmo de Buchberger.

**DOI:** 10.36788/sah.v8i2.151

**Recibido:** 11 de mayo de 2024.

**Aceptado:** 01 de octubre de 2024.

## 1. Introducción

La resolución de ecuaciones es un tema central en las matemáticas. En nuestros primeros cursos de secundaria aprendemos a factorizar polinomios en una variable, lo que nos permite encontrar sus raíces. Más adelante nos encontramos con sistemas de ecuaciones lineales y las correspondientes técnicas para resolverlos. A diferencia de una ecuación polinomial en una variable, donde sólo hay una cantidad finita de soluciones, en álgebra lineal aprendemos que un sistema de ecuaciones podría tener una cantidad infinita de soluciones. El objetivo de este artículo es exponer un método de resolución de ecuaciones polinomiales que tienen una cantidad finita de soluciones.

Dado un sistema de ecuaciones lineales con una única solución, el método de eliminación de Gauss es un algoritmo que permite encontrarla. Recordemos que este método consiste en realizar operaciones elementales en la matriz asociada al sistema, lo que da lugar a una matriz escalonada. Este método funciona gracias a que las ecuaciones son lineales. ¿Cómo podríamos encontrar las soluciones de un sistema de polinomios no necesariamente lineales? Por ejemplo, ¿puede la lectora o el lector imaginar cómo se encuentran las soluciones del

siguiente sistema?

$$\begin{aligned} 3x^7y - z^8 + 1 &= 0 \\ \sqrt{3}w^{15} - xyz^5 - x^2 &= 0 \\ 7y^{101}w^3 + \frac{2}{5}x^4 + \pi z^{10} &= 0 \\ x^2 + y^3 + z^5 + w^8 &= 0 \end{aligned}$$

Pese a ser una pregunta elemental, es sorprendente que los primeros algoritmos computacionales para resolver este tipo de ecuaciones no aparecieron sino hasta mediados del siglo XX (ver el prefacio de [2]). En este artículo buscamos ilustrar, a partir de ejemplos concretos, algunas ideas básicas en torno a un algoritmo de resolución de ecuaciones polinomiales. Como veremos, este algoritmo tiene similitudes importantes con respecto al método de Gauss: esencialmente se trata de reducir el sistema a otro que tiene *forma escalonada*.

## 2. Ecuaciones polinomiales en una variable

En esta primera sección hacemos un breve recordatorio del cálculo de las raíces de un polinomio en una variable.

Denotamos como  $\mathbb{C}[x]$  al conjunto de los polinomios en la variable  $x$  con coeficientes en los números complejos. En secundaria aprendimos que los polinomios lineales  $ax + b = 0$ , con  $a \neq 0$ , tienen una única raíz, a saber,  $x = -\frac{b}{a}$ . También nos enseñaron que los polinomios de grado 2,  $ax^2 + bx + c = 0$ , con  $a \neq 0$ , tienen una o dos raíces y se resuelven con la fórmula general  $x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$ . Para polinomios de grado 3 y 4 también existen fórmulas que calculan sus raíces, aunque son mucho más complicadas [13, Capítulo 5]. El problema de encontrar una fórmula que permitiera obtener las raíces de un polinomio de grado mayor o igual a 5 intrigó a la comunidad matemática por mucho tiempo. Hoy en día es bien sabido que tal fórmula no existe.

**Teorema 1. (Teorema de Abel).** *No existe una fórmula que involucre sumas, restas, multiplicaciones, divisiones, potencias o radicales que obtenga las raíces de todos los polinomios de grado mayor o igual que 5.*

El teorema de Abel muestra la imposibilidad de encontrar una fórmula que describa las raíces de cualquier polinomio. Por otro lado, un resultado clásico en álgebra nos asegura la existencia de tales raíces.

**Teorema 2. (Teorema fundamental del álgebra).** *Sea  $f(x) \in \mathbb{C}[x]$  un polinomio de grado mayor o igual a 1. Entonces la ecuación  $f(x) = 0$  tiene al menos una solución  $p \in \mathbb{C}$ .*

Tanto el teorema de Abel como el teorema fundamental del álgebra son resultados clásicos en álgebra y se pueden encontrar en muchas fuentes. Por citar algunas, se pueden consultar en [9, Capítulo 5] y [1, Capítulo 4].

Ahora bien, ante la falta de una fórmula general para encontrar las raíces de un polinomio, se tiene la opción de aproximarlas numéricamente. Esta es un área de las matemáticas que se ha desarrollado enormemente y que tiene importantes aplicaciones en problemas de la vida real.

### 3. Sistema de ecuaciones lineales

En esta sección hacemos un breve recordatorio del método de eliminación de Gauss para resolver ecuaciones lineales. Un sistema de  $m$  ecuaciones lineales con  $n$  incógnitas tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + \cdots + a_{mn}x_n &= b_m, \end{aligned}$$

donde para cada  $i \in \{1, 2, \dots, m\}$  y  $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ ,  $a_{ij} \in \mathbb{C}$  y  $b_i \in \mathbb{C}$ . Este sistema de ecuaciones se puede escribir como  $AX = b$ , donde

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}.$$

Recordemos el algoritmo para resolver estas ecuaciones. De entrada, diremos que dos sistemas de ecuaciones lineales  $AX = b$  y  $BX = c$  son equivalentes si tienen el mismo conjunto de soluciones. Ahora bien, dado un sistema de ecuaciones lineales  $AX = b$  definimos la matriz aumentada  $A|b$  como la matriz cuyas primeras  $n$  columnas son las columnas de  $A$  y cuya última columna es  $b$ . Decimos que  $A|b$  es equivalente a  $B|c$  si los sistemas de ecuaciones lineales correspondientes  $AX = b$  y  $BX = c$  son equivalentes.

**Teorema 3.** [6, Sección 3.4] Sean  $A|b$  y  $B|c$  dos matrices de  $m$  renglones y  $n + 1$  columnas con entradas en  $\mathbb{C}$ .  $A|b$  y  $B|c$  son equivalentes si  $B|c$  se obtuvo de  $A|b$  al aplicar una de las siguientes operaciones fila:

1. Intercambio de dos filas de  $A|b$ .
2. Multiplicar una fila de  $A|b$  por un escalar  $c \in \mathbb{C}$ ,  $c \neq 0$ .
3. Reemplazar la  $r$ -ésima fila de  $A|b$  por la fila  $r$  más la fila  $s$  multiplicada por un escalar  $c \in \mathbb{C}$ .

Para resolver un sistema de ecuaciones lineales  $AX = b$  debemos aplicar sucesivamente a la matriz aumentada  $A|b$  operaciones de cualquiera de los tres tipos que se mencionan en el teorema 3. De esta manera se puede obtener un sistema de ecuaciones más sencillo, de donde es más fácil obtener las soluciones.

Veamos el siguiente ejemplo que ilustra el procedimiento anterior. Supongamos que queremos resolver el sistema lineal:

$$\begin{aligned} x + y + z &= 2, \\ x + y - z &= 4, \\ x + 2y + 2z &= 3. \end{aligned} \tag{1}$$

La matriz aumentada del sistema es:

$$\left[ \begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & -1 & 4 \\ 1 & 2 & 2 & 3 \end{array} \right].$$

Aplicando las operaciones fila a la matriz anterior obtenemos

$$\left[ \begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & -1 & 4 \\ 1 & 2 & 2 & 3 \end{array} \right] \rightarrow \left[ \begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & -2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 3 \end{array} \right] \rightarrow \left[ \begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -2 & 2 \end{array} \right] \rightarrow \left[ \begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & -2 \end{array} \right]$$

Así el sistema de ecuaciones (1) es equivalente al sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} x + y + z = 2 \\ y + z = 1 \\ 2z = -2. \end{cases}$$

Despejando y haciendo sustitución hacia atrás obtenemos que la solución es el punto  $(1, 2, -1)$ .

El procedimiento anterior es llamado el método de eliminación de Gauss, que consiste en aplicar sucesivamente operaciones fila a la matriz aumentada  $A|b$  hasta convertirla en una matriz escalonada. Un tratamiento extenso de este tema se puede consultar en numerosas fuentes (ver, por ejemplo, [6, Capítulo 3]).

El siguiente enunciado es una reformulación del Teorema 3.14 en [6]. Lo escribimos de esta manera para ilustrar un primer caso de un resultado análogo que veremos más adelante, en el caso de ciertos sistemas de ecuaciones polinomiales (Teorema 16).

**Teorema 4.** *Dado un sistema de  $m$  ecuaciones lineales con  $n$  incógnitas existe un sistema de  $m'$  ecuaciones lineales con  $n$  incógnitas que tiene el mismo conjunto de soluciones,  $m' \leq m$  y para cada  $i \in \{2, \dots, m'\}$  la ecuación  $i$ -ésima de este nuevo sistema de ecuaciones no tiene a las primeras  $i - 1$  variables como incógnitas.*

## 4. Sistemas de ecuaciones polinomiales

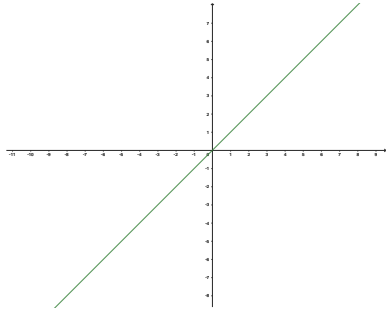
Denotamos al conjunto de polinomios en  $n$  variables con coeficientes en  $\mathbb{C}$  como  $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ . Dada una cantidad finita de polinomios  $f_1, \dots, f_s \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ , queremos describir las soluciones del sistema de ecuaciones  $\{f_1 = \dots = f_s = 0\}$ . En otras palabras, buscamos describir el conjunto

$$\{p \in \mathbb{C}^n \mid f_1(p) = \dots = f_s(p) = 0\}.$$

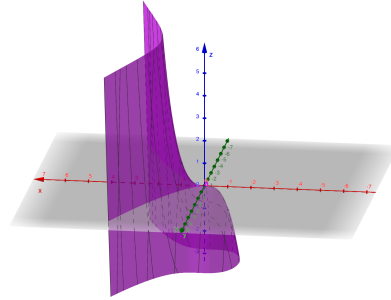
A diferencia del caso de polinomios en una variable, donde solo el polinomio cero tiene infinitas raíces, en varias variables el conjunto de soluciones a una ecuación polinomial es típicamente infinito.



Por ejemplo: las soluciones de la ecuación  $x - y = 0$  es una recta en  $\mathbb{R}^2$ . En las siguientes figuras podemos ver la forma de los conjuntos de soluciones de diferentes ecuaciones polinomiales.



$$\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : x - y = 0\}$$



$$\{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x^3 - y^2 - z = 0\}$$

Ahora bien, asumiendo que un sistema de ecuaciones polinomiales tiene una cantidad finita de soluciones, ¿cómo podemos encontrarlas? Antes vimos que el método de Gauss nos permite encontrar soluciones de ecuaciones lineales: el sistema original se reemplaza por un sistema equivalente que tiene forma escalonada, es decir, hay una ecuación que depende sólo de la variable  $x_n$ , una segunda ecuación que depende sólo de las variables  $x_{n-1}$  y  $x_n$ , y así sucesivamente. Veamos que una idea similar también se puede usar para resolver ecuaciones polinomiales más generales.

#### 4.1. Sistemas de ecuaciones polinomiales equivalentes

Para empezar veamos que, así como en álgebra lineal, podemos buscar sistemas equivalentes de ecuaciones polinomiales. En el siguiente resultado introducimos un objeto clave para tal efecto.

**Lema 5.** Sean  $f_1, \dots, f_s$  polinomios en  $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ . Consideremos el conjunto

$$\langle f_1, \dots, f_s \rangle := \left\{ \sum_{i=1}^s h_i f_i \mid h_i \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n] \right\}.$$

Dado  $p \in \mathbb{C}^n$ , se tiene que  $f_1(p) = \dots = f_s(p) = 0$  si y sólo si  $F(p) = 0$  para cada  $F \in \langle f_1, \dots, f_s \rangle$ .

**Demostración.** Si  $p \in \mathbb{C}^n$  es tal que  $f_i(p) = 0$  para toda  $i$ , entonces

$$\left( \sum_{i=1}^s h_i f_i \right)(p) = \sum_{i=1}^s h_i(p) f_i(p) = 0.$$

La otra implicación es consecuencia de que  $\{f_1, \dots, f_s\} \subset \langle f_1, \dots, f_s \rangle$ .

Este lema tiene el siguiente importante corolario.

**Corolario 6.** Si  $\langle f_1, \dots, f_s \rangle = \langle g_1, \dots, g_r \rangle$ , entonces las soluciones del sistema  $f_1 = \dots = f_s = 0$  son iguales a las soluciones del sistema  $g_1 = \dots = g_r = 0$ .

Notemos que, en efecto, podría suceder que  $\langle f_1, \dots, f_s \rangle = \langle g_1, \dots, g_r \rangle$  para distintas colecciones de polinomios  $\{f_i\}$  y  $\{g_j\}$ . Por ejemplo, un cálculo directo permite mostrar que  $\langle x+y, x \rangle = \langle y, x, x^2 \rangle$ .

Enseguida vamos a explorar un ejemplo del cálculo de las soluciones de un sistema de ecuaciones polinomiales.

**Ejemplo 7.** Queremos encontrar las soluciones del siguiente sistema:

$$\begin{aligned} f_1 &:= xy - z = 0, \\ f_2 &:= yz - x = 0, \\ f_3 &:= xz - y = 0. \end{aligned} \tag{2}$$

Así como en el algoritmo de Gauss, vamos a intentar simplificar este sistema. Para ello, consideramos las siguientes combinaciones de  $f_1$ ,  $f_2$  y  $f_3$ :

$$\begin{aligned} f_4 &:= f_1 + yf_2 = y^2z - z, \\ f_5 &:= zf_1 - yf_3 = y^2 - z^2, \\ f_6 &:= f_4 - zf_5 = z^3 - z. \end{aligned} \tag{3}$$

Por construcción tenemos que  $\{f_4, f_5, f_6\} \subset \langle f_1, f_2, f_3 \rangle$ . En particular,

$$\langle f_1, f_2, f_3 \rangle = \langle f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6 \rangle,$$

por lo que nuestro sistema es equivalente a  $f_1 = f_2 = f_3 = f_4 = f_5 = f_6 = 0$ . Ahora bien, ¿qué ganamos al cambiar el sistema  $f_1 = f_2 = f_3 = 0$  por  $f_1 = f_2 = f_3 = f_4 = f_5 = f_6 = 0$ ? De entrada podríamos tener la impresión de que sólo complicamos aún más el sistema. Afortunadamente, no es el caso. Notemos que en el nuevo sistema hay algunos polinomios especiales:  $f_6$ , que depende sólo de la variable  $z$ , y  $f_5$ , que depende de las variables  $y, z$ . Esto nos permite encontrar las soluciones del sistema.

En efecto, primero buscamos las soluciones de  $f_6 = 0$ , es decir,  $z = 0$ ,  $z = 1$  o  $z = -1$ . Enseguida evaluamos cada una de estas raíces en  $f_5$  (también podría ser  $f_4$ ) y encontramos los valores respectivos para  $y$ , esto es:  $(0, 0)$ ,  $(1, 1)$ ,  $(-1, 1)$ ,  $(1, -1)$  y  $(-1, -1)$ . Ahora usamos estos valores para encontrar las soluciones en la variable  $x$ . Para esto, evaluamos en el polinomio  $f_2$ . Así, las soluciones del sistema  $f_6 = f_5 = f_2 = 0$  son

$$S := \{(0, 0, 0), (1, 1, 1), (-1, -1, 1), (-1, 1, -1), (1, -1, -1)\}.$$

Finalmente, tendríamos que eliminar los elementos de este conjunto que no son ceros de  $f_1$ ,  $f_3$  y  $f_4$ . En este caso, estos elementos también son solución de  $f_1 = f_3 = f_4 = 0$ . Concluimos que

$$\{p \in \mathbb{C}^3 \mid f_1(p) = f_2(p) = f_3(p) = 0\} = S.$$

**Observaciones 8.** Queremos enfatizar los siguientes aspectos del ejemplo 7:

- Para resolver el sistema  $f_1 = f_2 = f_3 = 0$ , lo sustituimos por un sistema con más ecuaciones, a saber,  $f_1 = f_2 = f_3 = f_4 = f_5 = f_6 = 0$ .
- La construcción de  $f_4$ ,  $f_5$  y  $f_6$  en (3) se efectuó buscando cancelar ciertos términos de los polinomios con los que empezamos.

- Gracias a la cancelación descrita en el punto anterior, se lograron construir polinomios en menos variables, concretamente, un polinomio en  $z$  y otros en  $y, z$ .
- El problema de encontrar las soluciones al sistema se redujo entonces a buscar raíces de polinomios en una variable.

La observación 8 ilustra un algoritmo general para resolver sistemas de ecuaciones polinomiales con una cantidad finita de soluciones. Como se menciona en la observación, un paso clave en el ejemplo 7 consistió en cancelar ciertos términos de los polinomios en cuestión. En la siguiente subsección explicamos cómo hacer esto de manera sistemática, para cualquier sistema de ecuaciones polinomiales.

## 4.2. Algoritmo de Buchberger

De entrada, necesitamos introducir dos conceptos: el orden lexicográfico para ordenar los monomios de un polinomio y un algoritmo de la división en  $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ .

**Definición 9.** Sean  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n), \beta = (\beta_1, \dots, \beta_n) \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^n$ . Decimos que  $\alpha >_{lex} \beta$  si en la diferencia  $\alpha - \beta \in \mathbb{Z}^n$  la entrada no cero que esté más a la izquierda es positiva. Dados dos monomios  $x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}$  y  $x^\beta = x_1^{\beta_1} \cdots x_n^{\beta_n}$ , diremos que  $x^\alpha >_{lex} x^\beta$  si  $\alpha >_{lex} \beta$ .

Sea  $f = a_{\alpha_1} x^{\alpha_1} + \cdots + a_{\alpha_r} x^{\alpha_r} \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ , con  $a_{\alpha_i} \neq 0$  para cada  $i$ . Llamamos el término líder de  $f$  al término  $a_{\alpha_i} x^{\alpha_i}$ , donde  $\alpha_i$  es el vector más grande respecto al orden lexicográfico. Lo denotamos  $LT(f)$ .

**Ejemplo 10.** Sean  $\alpha = (5, 2, 1)$  y  $\beta = (5, 1, 3)$ . Entonces  $x^\alpha = x_1^5 x_2^2 x_3 >_{lex} x_1^5 x_2 x_3^3 = x^\beta$  puesto que  $\alpha - \beta = (0, 1, -2)$ . Así, si  $f = 5x_1^5 x_2 x_3^3 - 3x_1^5 x_2^2 x_3$ , entonces  $LT(f) = -3x_1^5 x_2^2 x_3$ .

Antes de describir el algoritmo de la división en  $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ , presentamos un ejemplo para familiarizarse con el procedimiento. Como veremos, este algoritmo no es muy distinto del algoritmo de la división clásico. El objetivo es dividir un polinomio entre un conjunto finito de polinomios.

Sean  $f = x^2 y + x y^2 + y^2$  y  $f_1 = y^2 - 1, f_2 = x y - 1$ . Nuestro propósito es dividir  $f$  entre  $\{f_1, f_2\}$ , es decir, expresar  $f = a_1 f_1 + a_2 f_2 + r$  para algunos polinomios  $a_1, a_2$  y  $r$ , donde  $r$  es un residuo.

Notemos que los monomios de los polinomios  $f, f_1$  y  $f_2$  están ordenados de manera decreciente bajo el orden lexicográfico. En particular,  $LT(f) = x^2 y, LT(f_1) = y^2$  y  $LT(f_2) = x y$ . Vamos a realizar la siguiente división:

$$\begin{array}{r} a_1 : \\ a_2 : \\ y^2 - 1 \quad \overline{|x^2 y + x y^2 + y^2} \\ xy - 1 \end{array}$$

Empezamos comparando el término líder de  $f$  entre el término líder de  $f_1$ . Si lo divide continuamos como en el algoritmo en una variable. De lo contrario, pasamos al término líder de  $f_2$ . En este caso,

$LT(f)$  no es divisible por  $LT(f_1)$  pero sí por  $LT(f_2)$ . De esta manera,

$$\begin{array}{r} a_1 : \\ a_2 : \quad x \\ y^2 - 1 \quad | \quad x^2y + xy^2 + y^2 \\ xy - 1 \quad \underline{x^2y - x} \\ \phantom{xy - 1} \quad \quad \quad xy^2 + x + y^2 \end{array}$$

Ahora consideremos el término líder de  $xy^2 + x + y^2$ , *i.e.*  $xy^2$ . Repetimos el procedimiento. Como  $LT(f_1)$  divide a  $xy^2$  se obtiene

$$\begin{array}{r} a_1 : \quad x \\ a_2 : \quad x \\ y^2 - 1 \quad | \quad x^2y + xy^2 + y^2 \\ xy - 1 \quad \underline{x^2y - x} \\ \phantom{xy - 1} \quad \quad \quad xy^2 + x + y^2 \\ \phantom{xy - 1} \quad \quad \quad \underline{xy^2 - x} \\ \phantom{xy - 1} \quad \quad \quad \quad \quad \quad 2x + y^2 \end{array}$$

Notemos que el término líder de  $2x + y^2$ , *i.e.*  $2x$ , no es divisible por los términos líderes de  $f_1$  y  $f_2$ . El algoritmo de la división clásico se detendría en este momento. Por el contrario, para el algoritmo de la división en varias variables, el siguiente paso consiste en pasar el término  $2x$  al residuo. Ahora comparamos el siguiente término, es decir,  $y^2$ . Repetimos el procedimiento para obtener:

$$\begin{array}{r} a_1 : \quad x + 1 \\ a_2 : \quad x \\ y^2 - 1 \quad | \quad x^2y + xy^2 + y^2 \\ xy - 1 \quad \underline{x^2y - x} \\ \phantom{xy - 1} \quad \quad \quad xy^2 + x + y^2 \\ \phantom{xy - 1} \quad \quad \quad \underline{xy^2 - x} \\ \phantom{xy - 1} \quad \quad \quad \quad \quad \quad 2x + y^2 \\ \phantom{xy - 1} \quad \quad \quad \quad \quad \quad \underline{y^2} \quad \quad \quad \longrightarrow \quad 2x \\ \phantom{xy - 1} \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \underline{y^2 - 1} \\ \phantom{xy - 1} \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \underline{1} \\ \phantom{xy - 1} \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad 0 \quad \longrightarrow \quad 2x + 1 \end{array}$$

El algoritmo dio lugar a la siguiente igualdad:

$$x^2y + xy^2 + y^2 = (x + 1)(y^2 - 1) + (x)(xy - 1) + 2x + 1.$$

El algoritmo previo se expresa de manera general como sigue (ver [2, Capítulo 2]).



**Proposición 11.** (*Algoritmo de la división*) Consideremos el orden lexicográfico para ordenar los términos de polinomios en  $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ . Sea  $F = \{f_1, \dots, f_s\} \subset \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ . Entonces cada  $f \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$  se puede escribir como

$$f = a_1 f_1 + \dots + a_s f_s + r,$$

donde  $a_i, r \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ . Además, si  $r \neq 0$  entonces  $r$  se escribe como una  $\mathbb{C}$ -combinación lineal de monomios que no son divisibles por ningún  $\text{LT}(f_i)$ ,  $i = 1, \dots, s$ . Decimos que  $r$  es el residuo de la división de  $f$  por  $F$ . Denotamos el residuo como  $\bar{f}^F$ .

Enseguida definimos el objeto clave que permite hacer las cancelaciones de las que hablamos en la sección anterior. Recordemos que dados dos monomios  $x^\alpha$  y  $x^\beta$ , su mínimo común múltiplo es el monomio  $x^\gamma$ , donde las entradas del vector  $\gamma$  están definidas por  $\gamma_i = \max\{\alpha_i, \beta_i\}$ . Lo denotamos como  $\text{mcm}(x^\alpha, x^\beta)$ .

**Definición 12.** Sean  $f, g \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$  dos polinomios distintos de cero. Sean  $\text{LT}(f) = a_\alpha x^\alpha$  y  $\text{LT}(g) = b_\beta x^\beta$  (ver definición 9). Sea  $x^\gamma$  el mínimo común múltiplo de  $x^\alpha$  y  $x^\beta$ . Definimos el  $S$ -polinomio de  $f$  y  $g$  como

$$S(f, g) = \frac{x^\gamma}{\text{LT}(f)} f - \frac{x^\gamma}{\text{LT}(g)} g.$$

Por construcción, un  $S$ -polinomio cancela términos líderes. En el siguiente ejemplo ilustramos esta propiedad. Como la lectora o el lector podrá apreciar, este ejemplo ya apareció en la sección anterior (ver la construcción de  $f_5$  en el ejemplo 7).

**Ejemplo 13.** Sean  $f = xy - z, g = xz - y \in \mathbb{C}[x, y, z]$ . Notemos que  $\text{LT}(f) = xy$  y  $\text{LT}(g) = xz$ . Además,  $xyz = \text{mcm}(xy, xz)$ . Así,

$$\begin{aligned} S(f, g) &= \frac{xyz}{xy} f - \frac{xyz}{xz} g \\ &= zf - yg \\ &= -z^2 + y^2. \end{aligned}$$

Notemos que en este ejemplo el  $S$ -polinomio es un polinomio que no contiene la variable  $x$  aunque  $f$  y  $g$  sí la contenían.

Con los ingredientes introducidos hasta ahora, estamos listos para describir el algoritmo que nos permitirá simplificar sistemas de ecuaciones polinomiales.

**Algoritmo 14. (Algoritmo de Buchberger)**

**INPUT:** Un conjunto de polinomios  $F = \{f_1, \dots, f_s\} \subset \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ .

**OUTPUT:** Un conjunto de polinomios  $G = \{g_1, \dots, g_r\}$  tales que  $F \subset G$  y para cada  $h \in \langle F \rangle$  existe  $g \in G$  tal que  $\text{LT}(g)$  divide a  $\text{LT}(h)$  y  $\langle F \rangle = \langle G \rangle$ .

El conjunto  $G$  se construye haciendo primero  $G = F$  y después iterando una cantidad finita de veces los siguientes pasos:

1. Fijamos una pareja de elementos de  $G$  y calculamos su  $S$ -polinomio.
2. Dividimos este  $S$ -polinomio entre  $G$ .

3. Si el residuo es cero volvemos al paso 1 con otra pareja de  $G$ . De lo contrario, dicho residuo se agrega a  $G$  y volvemos al paso 1.
4. Se repiten 1, 2 y 3 hasta que todos los residuos de los  $S$ -polinomios de  $G$  sean cero.

Una versión más detallada del algoritmo y su demostración se pueden consultar en [10, Sección 1.3]. Veamos un ejemplo para ilustrarlo.

**Ejemplo 15.** Sea  $F = \{f_1 = x^2y - 1, f_2 = xy^2 - x\}$ . Como paso inicial hacemos  $G = F$ . Ahora, calculamos el  $S$ -polinomio  $S(f_1, f_2) = x^2 - y$ . Dividiendo  $S(f_1, f_2)$  por  $F$  obtenemos el siguiente residuo:

$$\overline{S(f_1, f_2)}^G = x^2 - y \neq 0$$

Agregamos  $f_3 = x^2 - y$  a  $G$ . De esta forma, hacemos  $G = \{f_1, f_2, f_3\}$ . Calculamos un nuevo  $S$ -polinomio y su residuo respectivo,

$$S(f_1, f_3) = y^2 - 1, \quad \overline{S(f_1, f_3)}^G = y^2 - 1.$$

Agregamos este nuevo residuo  $f_4 = y^2 - 1$  a  $G$ . Así tenemos que ahora  $G = \{f_1, f_2, f_3, f_4\}$ . Calculando  $S$ -polinomios y dividiendo obtenemos que todos los residuos son cero. El algoritmo se detiene en este momento arrojando  $G = \{f_1 = x^2y - 1, f_2 = xy^2 - x, f_3 = x^2 - y, f_4 = y^2 - 1\}$ .

Este ejemplo ilustra nuevamente lo que sucedió en el ejemplo 7: los polinomios  $f_1$  y  $f_2$  contienen las variables  $x$  y  $y$  y con ciertas operaciones logramos construir el polinomio  $f_4$  que sólo depende de la variable  $y$ . Estos ejemplos son casos particulares del siguiente teorema.

**Teorema 16.** [8, Sección 1.8.5] Sean  $f_1, \dots, f_s \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$  tales que el sistema  $f_1 = \dots = f_s = 0$  tiene un número finito de soluciones. Sea  $\{g_1, \dots, g_r\}$  el conjunto de polinomios resultante del algoritmo 14. Entonces  $r \geq n$  y los polinomios  $g_i$  satisfacen lo siguiente:

$$\begin{array}{ll} g_n \in \mathbb{C}[x_n], & \text{LT}(g_n) = x_n^{a_n}, \\ g_{n-1} \in \mathbb{C}[x_{n-1}, x_n], & \text{LT}(g_{n-1}) = x_{n-1}^{a_{n-1}} \\ \vdots & \vdots \\ g_2 \in \mathbb{C}[x_2, \dots, x_{n-1}, x_n], & \text{LT}(g_2) = x_2^{a_2} \\ g_1 \in \mathbb{C}[x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n], & \text{LT}(g_1) = x_1^{a_1}. \end{array}$$

En particular, el sistema  $g_1 = \dots = g_r = 0$  se puede resolver encontrando las soluciones de  $g_n(x_n) = 0$ , enseguida sustituirlas en  $g_{n-1}(x_{n-1}, x_n) = 0$  y encontrar las soluciones respecto a la variable  $x_{n-1}$ , y así sucesivamente hasta  $g_1 = 0$ . Finalmente, se deben descartar las soluciones de  $g_1 = \dots = g_n = 0$  que no son soluciones de  $g_{n+1} = \dots = g_r = 0$ .

**Ejemplo 17.** Encontremos las soluciones del siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{array}{l} f_1 := x^2y - 1 = 0, \\ f_2 := xy^2 - x = 0. \end{array}$$

De acuerdo al ejemplo 15, el algoritmo 14 arroja  $G = \{x^2y - 1, xy^2 - x, x^2 - y, y^2 - 1\}$ . Ordenamos los elementos de  $G$  como sigue:  $G = \{g_1 = y^2 - 1, g_2 = x^2 - y, g_3 = xy^2 - x, g_4 = x^2y - 1\}$ . Así los



números  $r$  y  $n$  del teorema 16 son  $r = 4$  y  $n = 2$ . Ahora, buscamos las soluciones de  $g_1 = 0$ , es decir,  $y = 1$ ,  $y = -1$ . Enseguida evaluamos cada una de estas raíces en  $g_2 = 0$  y encontramos los valores respectivos para  $x$ , esto es:  $(1, 1)$ ,  $(-1, 1)$ ,  $(i, -1)$ ,  $(-i, -1)$ . A continuación verificamos si estas soluciones satisfacen  $g_3 = 0$  y  $g_4 = 0$ . Evaluando  $g_3$  y  $g_4$  en esas posibles soluciones observamos que se satisface  $g_3 = 0$  y  $g_4 = 0$ , por lo que en virtud del teorema 16 concluimos

$$\{p \in \mathbb{C}^2 \mid f_1(p) = f_2(p) = 0\} = \{(1, 1), (-1, 1), (i, -1), (-i, -1)\}.$$

## 5. Breve comentario sobre las bases de Gröbner

El conjunto que se construye en el algoritmo 4.2 es llamado una base de Gröbner de  $\langle f_1, \dots, f_s \rangle$  respecto al orden lexicográfico. En realidad, existe la noción de base de Gröbner respecto a cualquier orden monomial, es decir, un orden entre los monomios de  $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$  que es total, es compatible con la multiplicación y es un buen orden. Recomendamos ampliamente las referencias [2, 10] para una introducción a este importante concepto de álgebra conmutativa. La lectora o el lector también podrá encontrar una gran cantidad de artículos introductorios a este tema en línea. Además existen programas computacionales que realizan cálculos explícitos usando este concepto. Por citar algunos: Singular o Macaulay2 [4, 7]. Ambos pueden utilizarse de manera gratuita en línea.

El concepto de base de Gröbner tiene una enorme cantidad de aplicaciones, tanto en las matemáticas como en otras áreas. Por citar algunos ejemplos, las bases de Gröbner han sido utilizadas en problemas de geometría algebraica, de teoría de gráficas, de estadística algebraica, de programación entera, de teoría de códigos, de criptografía, de robótica, de procesamiento de señales, entre otros. Algunas de estas aplicaciones pueden consultarse en [5, 10, 11, 3, 12].

## Agradecimientos

Agradecemos enormemente a las revisoras o los revisores de este artículo. La cuidadosa lectura y las múltiples observaciones que recibimos nos ayudaron a mejorar sustancialmente la presentación de este trabajo. El primer autor agradece el apoyo del proyecto CONAHCYT A1-S-30482. El segundo autor agradece el apoyo del proyecto CONAHCYT CF-2023-G33.

## Referencias

- [1] L. V. Ahlfors, *Complex analysis*. McGraw-Hill New York, 1979.
- [2] D. Cox, J. Little, and D. O'Shea, *Ideals, Varieties, and Algorithms: An Introduction to Computational Algebraic Geometry and Commutative Algebra*, ser. Undergraduate texts in mathematics. Springer, 1997.
- [3] J. A. De Loera, R. Hemmecke, and M. Köppe, *Algebraic and geometric ideas in the theory of discrete optimization*. SIAM, 2012.
- [4] W. Decker, G. Greuel, G. Pfister, and H. Schönemann, "Singular 4-3-0—a computer algebra system for polynomial computations. <http://www.singular.uni-kl.de>," 2022.
- [5] V. Ene and J. Herzog, *Gröbner bases in commutative algebra*. American Mathematical Soc., 2011, vol. 130.
- [6] S. H. Friedberg, A. J. Insel, and L. E. Spence, *Linear Algebra: Pearson New International Edition*. Pearson Higher Ed, 2013.
- [7] D. R. Grayson and M. E. Stillman, "Macaulay2, a software system for research in algebraic geometry available at <http://www.math.uiuc.edu>," 1992.
- [8] G.-M. Greuel, G. Pfister, O. Bachmann, C. Lossen, and H. Schönemann, *A Singular introduction to commutative algebra*. Springer, 2008, vol. 348.
- [9] I. N. Herstein, *Topics in algebra*. John Wiley & Sons, 1991.
- [10] T. Hibi, *Gröbner Bases: Statistics and Software Systems*. Springer, 2013.
- [11] M. Husty and P. Zsombor-Murray, "On the use of gröbner bases in a robotics course," in *New Trends in Educational Activity in the Field of Mechanism and Machine Theory: 2014-2017*. Springer, 2019, pp. 20–28.
- [12] M. Sala, T. Mora, L. Perret, S. Sakata, and C. Traverso, *Gröbner Bases, Coding, and Cryptography*. Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- [13] J. V. Uspensky, *Teoría de ecuaciones*. Limusa, México, 2006.

**Como citar este artículo:** H. de Alba Casillas y D. Duarte, "Resolviendo ecuaciones polinomiales", Sahuarus. Revista Electrónica de Matemática, vol. 8, no. 2, pp. 1–12, 2024. <https://doi.org/10.36788/sah.v8i2.151>



# 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.

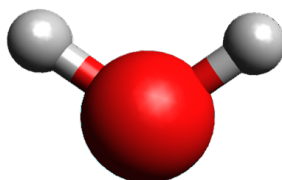


Figura 1: Molécula del agua  $H_2O$ .

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

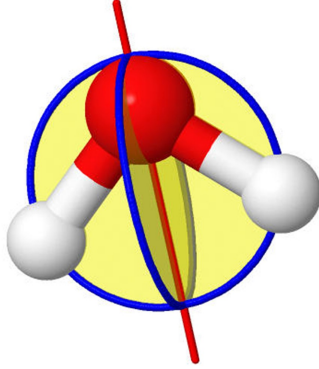
$$V(M) = \{a_1, a_2, a_3\}, \quad E(M) = \{\{a_1, a_3\}, \{a_2, a_3\}\}, \quad \nu(a_1) = \nu(a_2) = H, \quad \nu(a_3) = O.$$

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, las 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)).

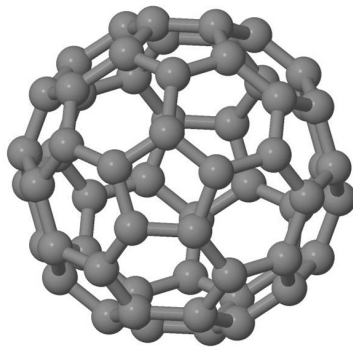


Figura 3: Buckminsterfullereno  $C_{60}$

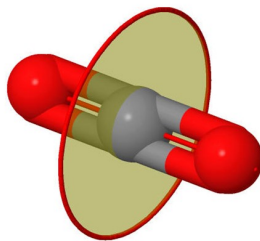


Figura 4: Dióxido de carbono  $CO_2$

## 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).

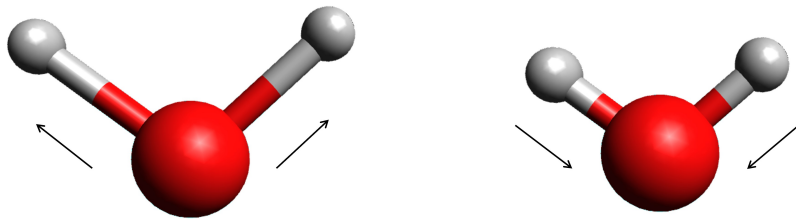


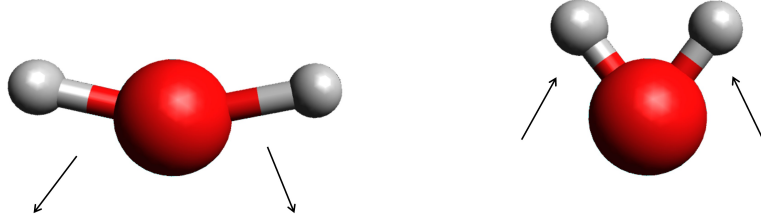
Figura 5: Estiramiento simétrico de  $H_2O$



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

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

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

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

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*  $GL_n(\mathbb{F})$  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  $GL_n(\mathbb{F})$  y el grupo de transformaciones lineales invertibles del espacio vectorial  $\mathbb{F}^n$ . Por lo tanto, siempre podemos identificar a una matriz  $T \in GL_n(\mathbb{F})$  con su respectiva transformación lineal invertible.

Dado cualquier grupo  $G$ , una *representación de grado  $n$*  de  $G$  es una función  $\rho : G \rightarrow GL_n(\mathbb{F})$  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  $\rho(g) \in GL_n(\mathbb{F})$ , 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  $\rho : G \rightarrow GL_n(\mathbb{F})$  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  $\rho : G \rightarrow GL_n(\mathbb{F})$ , 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  $\rho : G \rightarrow GL_n(\mathbb{F})$  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  $\rho : G \rightarrow GL_n(\mathbb{C})$  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

$$\rho(\sigma_{yz}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & | & -1 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 1 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 1 & | & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\rho(\sigma_{xz}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & | & 1 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & -1 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 1 & | & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\rho(C_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & | & -1 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & -1 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 1 & | & 0 & 0 & 0 \\ \hline -1 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

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 *crystalografía*, 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", Sahuarus. Revista Electrónica de Matemáticas, vol. 8, no. 2, pp. 13-27, 2024. <https://10.36788/sah.v8i2.154>.