

DOI: <https://doi.org/10.47234/mm.7701>

Una breve introducción a los grupos de simetría molecular

Alonso Castillo Ramírez

Departamento de Matemáticas, Centro Universitario de Ciencias
Exactas e Ingenierías,
Universidad de Guadalajara
alonso.castillor@academicos.udg.mx

y

Aikaterini Diamanti

Departamento de Química, Centro Universitario de Ciencias
Exactas e Ingenierías
Universidad de Guadalajara
aikaterini.diamanti@academicos.udg.mx

1. Introducción

La *simetría* es un concepto básico ligado a muchas áreas de la ciencia y el arte (figura 1). Intuitivamente, pensamos que un objeto es simétrico si tiene una proporción o un balance armónico. Sin embargo, en matemáticas, este término tiene un significado más riguroso, al referirse a una *transformación* de un objeto X que no altera algunas de sus características esenciales. A la colección de todas las simetrías de X , considerada junto a la composición de funciones, se le conoce como el *grupo de simetría* de X , ya que satisface las propiedades de la estructura algebraica conocida como *grupo*.

El estudio de grupos de simetría de *moléculas* (i.e., colecciones de átomos unidos por enlaces químicos) constituye el área de la química llamada *simetría molecular*, la cual es comúnmente estudiada incluso en programas de pregrado en química y áreas afines. La idea principal en esta área es que el grupo de simetría de una molécula puede explicar o predecir algunas de las propiedades químicas y físicas de la molécula. Por ejemplo, la ecuación diferencial que determina la vibración de

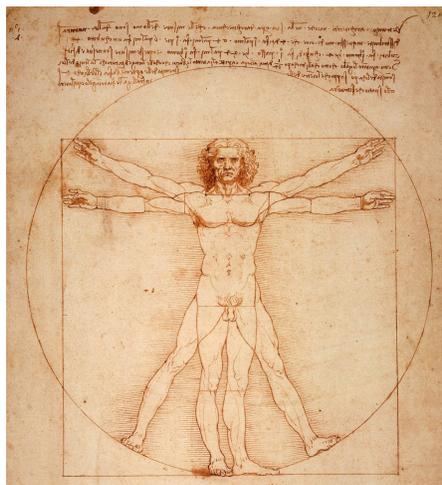


Figura 1. Estudio de la simetría humana en el *Hombre de Vitruvio* de Leonardo da Vinci.

una molécula puede resolverse con ayuda del grupo de simetría de la molécula ([7, cap. 32]).

Esta nota está dirigida a estudiantes de matemáticas interesados en conocer las aplicaciones de la teoría de grupos a la química, o a estudiantes de química interesados en conocer los fundamentos matemáticos de lo que estudian en simetría molecular. Asumimos que el lector está familiarizado con nociones básicas de teoría de conjuntos, funciones y álgebra lineal.

El objetivo de este trabajo es fomentar una mayor interacción entre matemáticos y químicos en áreas de interés común. La gran mayoría de artículos y libros de simetría molecular están dirigidos a la comunidad química; si bien presentan los fundamentos de teoría de grupos con solidez y rigor (ej. [5]), representan sus grupos usando la *notación de Schoenflies*, la cual es generalmente desconocida por la comunidad matemática. Consideramos que esta falta de conciliación entre notaciones es un obstáculo importante que dificulta la interacción. Por ejemplo, este problema queda perfectamente ilustrado con la permanencia por décadas de dos errores en las tablas de caracteres de grupos de simetría usadas por la comunidad química: los errores datan de 1955 y 1971, y finalmente fueron corregidos en 2007 [11].

A continuación describiremos la estructura de este artículo. En la sección 2, formalizamos el concepto de *grupo* como un conjunto con una operación que satisface cuatro axiomas. Dado un objeto matemático X , definimos a una simetría de X como un función invertible $\tau : X \rightarrow X$ que preserve algunas propiedades de X . Terminamos esta sección demostrando que el conjunto de todas las simetrías de X , junto con la composición de funciones, forma un grupo, denotado por $\text{Aut}(X)$.

En la sección 3, nos enfocamos en estudiar simetrías del espacio euclídeo \mathbb{R}^3 : en particular, nos interesan las funciones invertibles $T : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ que preservan la distancia entre puntos y fijan el origen, ya que estas son las simetrías pertinentes en el estudio de las moléculas. Justificamos que este tipo de funciones siempre pueden representarse por la multiplicación por una matriz ortogonal de 3×3 , y demostramos que forman un grupo. También mostramos algunos ejemplos explícitos que representan simetrías como rotaciones y reflexiones.

En la sección 4, discutimos grupos de simetría de moléculas. Primero, mostramos que el grupo de simetría del agua H_2O tiene solo 4 elementos y es isomorfo al grupo de Klein $\mathbb{Z}_2 \oplus \mathbb{Z}_2$. En contraste con la sencillez del grupo anterior, presentamos al grupo de simetría del buckminsterfullereno C_{60} , el cual tiene 120 elementos al ser isomorfo al grupo simétrico S_5 ; en este caso, tanto la molécula en cuestión como su grupo de simetría presentan diversas características excepcionales. Aunque la mayoría de los grupos de simetría de moléculas son finitos, observamos que moléculas lineales, como el dióxido de carbono CO_2 , tienen grupos de simetría infinitos. Terminamos la sección con dos comentarios: uno sobre las diferentes notaciones de grupos de simetría usadas por químicos y matemáticos, y otro sobre el uso de herramientas matemáticas más sofisticadas, como la tabla de caracteres de representaciones irreducibles, para el estudio de grupos de simetría molecular.

2. Grupos

A partir de esta sección, asumimos que el lector está familiarizado con el uso de conjuntos y funciones. Para una introducción general a estos temas, sugerimos consultar [3].

Dado un conjunto G , una *operación binaria* de G es una función que asigna a cada par de elementos de G un elemento de G . Si denotamos con un punto \cdot a una operación binaria de G , el resultado de operar dos elementos $a, b \in G$ se denota por $a \cdot b$.

Definición 2.1. Un *grupo* es un conjunto G y una operación binaria \cdot que satisface las siguientes propiedades:

0. **Cerradura:** Para todo $a, b \in G$, se cumple que $a \cdot b \in G$.
1. **Asociatividad:** Para todo $a, b, c \in G$, se cumple que $a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$.
2. **Existencia del elemento identidad:** Existe un elemento $e \in G$ tal que para todo $a \in G$ se cumple que $e \cdot a = a \cdot e = a$.
3. **Existencia de inversos:** Para todo $a \in G$ existe un elemento denotado por $a^{-1} \in G$ que cumple que $a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e$.

El elemento $e \in G$ descrito en la propiedad (2.) se llama *elemento identidad*, mientras que el elemento $a^{-1} \in G$ descrito en la propiedad (3.) se llama *inverso de $a \in G$* . Decimos que G es un grupo *abeliano* si adicionalmente cumple la siguiente propiedad:

4. **Conmutatividad:** Para todo $a, b \in G$, se cumple que $a \cdot b = b \cdot a$.

Ejemplo 2.2. Uno de los grupos más conocidos es el conjunto de los números enteros \mathbb{Z} , con la suma usual $+$ de números enteros. El lector puede comprobar fácilmente que se cumplen las cuatro propiedades de la definición de grupo (en este caso, la identidad es 0 y el inverso de $a \in \mathbb{Z}$ se denota por $-a \in \mathbb{Z}$). Además, \mathbb{Z} es un grupo abeliano pues la suma usual es conmutativa.

Para conocer más ejemplos y propiedades de los grupos recomendamos el libro [4].

Dado un objeto matemático X , una *simetría* de X es una transformación $\sigma : X \rightarrow X$ que preserva algunas propiedades matemáticas de X . En ocasiones, un mismo objeto X puede satisfacer una gran variedad de propiedades matemáticas, por lo que las simetrías de X dependerán de las propiedades específicas que se quieran considerar. Por ejemplo, si suponemos que $X = \Delta$ es un triángulo equilátero, las simetrías de Δ son aquellas transformaciones que no alteran ni la forma, ni la posición, ni la estructura del triángulo (i.e., las distancias entre los puntos que lo constituyen). En otras palabras, una transformación de Δ será una simetría si y solo si no es posible detectar ninguna alteración en el triángulo después de aplicar la transformación.

La figura 2 muestra que Δ tiene exactamente seis simetrías: la rotación de 120° , la rotación de 240° , la rotación de 360° (que es igual a la rotación de 0° , y es el elemento identidad), y las tres reflexiones a través de las tres mediatrices del triángulo.

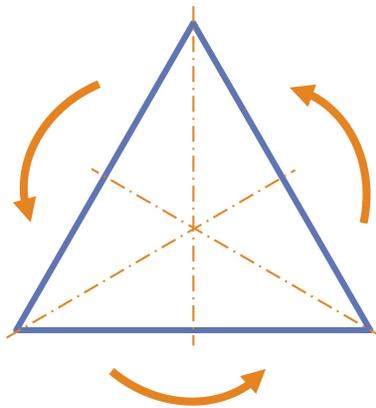


Figura 2. Simetrías de un triángulo equilátero.

Dadas dos simetrías $\sigma : X \rightarrow X$ y $\tau : X \rightarrow X$, podemos obtener la *composición* $\sigma \circ \tau : X \rightarrow X$, la cual es la transformación de X que consiste en aplicar primero la simetría τ y después la simetría σ . Claramente, la transformación $\sigma \circ \tau : X \rightarrow X$ también preserva las propiedades de interés de X debido a que τ y σ ambas lo hacen.

En el caso del triángulo equilátero Δ , la figura 3 nos ayuda a verificar que la reflexión a través de la mediatriz que pasa por el vértice (2) compuesta con la rotación de 120° es igual a la reflexión a través de la mediatriz que pasa por el vértice (1). De manera similar, el lector puede verificar que todas las composiciones entre las seis simetrías de Δ dan como resultado una simetría de Δ .

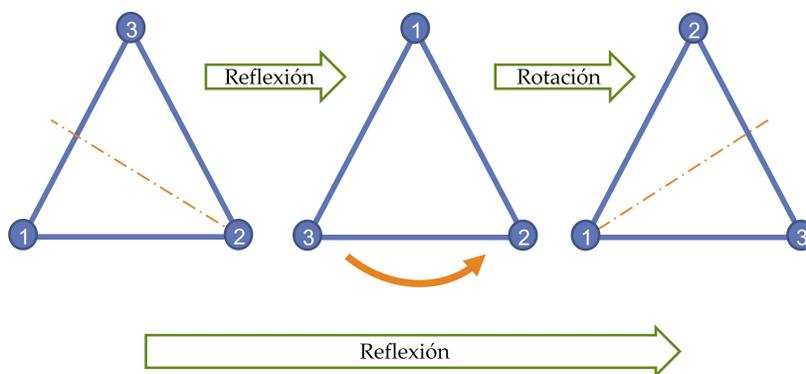


Figura 3. Composición de simetrías de un triángulo equilátero.

Dada una simetría $\sigma : X \rightarrow X$, es natural asumir que el objeto transformado $\sigma(X)$ debe ser «similar», o «equivalente» en cierto sentido, al objeto original X . Esto implica que si pudimos obtener a $\sigma(X)$ a partir de X aplicando una simetría, también deberíamos poder obtener a X a partir de $\sigma(X)$ aplicando una simetría.

Regresando al ejemplo del triángulo equilátero Δ , el colapso de dos de sus vértices (figura 4) no puede ser una simetría de Δ (incluso si relajamos las propiedades de interés), pues no podemos recuperar el objeto original una vez hecho el colapso (el objeto pudo haber sido un cuadrado en el que colapsaron cuatro vértices: no hay forma de recuperar la información con certeza).

Más formalmente, requerimos que una simetría $\sigma : X \rightarrow X$ sea *invertible*, en el sentido de que existe una simetría $\sigma^{-1} : X \rightarrow X$ (que también preserva las propiedades de interés de X) tal que

$$\sigma^{-1} \circ \sigma = \sigma \circ \sigma^{-1} = \text{id}_X,$$

donde $\text{id}_X : X \rightarrow X$ es la función identidad de X . A la transformación $\sigma^{-1} : X \rightarrow X$ la llamamos la *simetría inversa* de σ .

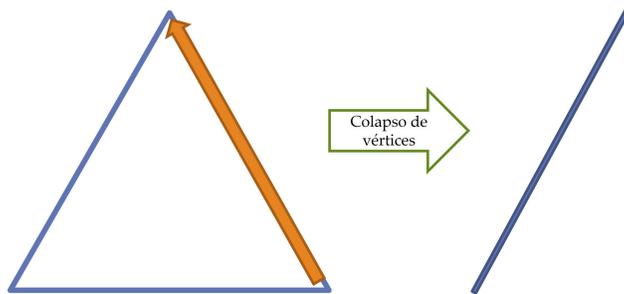


Figura 4. El colapso de dos vértices no puede ser una simetría.

Si $\sigma : X \rightarrow X$ es invertible, entonces es biyectiva (inyectiva y sobreyectiva), pero el recíproco no siempre es verdadero, pues es necesario que la *función inversa* de σ (definida usando la biyectividad) también preserve las propiedades de interés de X .¹

Con la discusión de los párrafos anteriores podemos demostrar el siguiente resultado.

Teorema 2.3. *El conjunto de simetrías de X , junto con la composición, es un grupo, al cual denotamos por $\text{Aut}(X)$.*

Demostración. Verificamos que se satisfacen todas las propiedades de la definición de grupo.

0. **Cerradura:** La composición $\sigma \circ \tau$ de dos simetrías σ y τ es una simetría, pues preserva las propiedades de X y es invertible (ya que su simetría inversa es $\tau^{-1} \circ \sigma^{-1}$).
1. **Asociatividad:** La composición es una operación asociativa, pues satisface que para toda $\rho, \sigma, \tau \in \text{Aut}(X)$, y para toda $x \in X$,

$$(\rho \circ (\sigma \circ \tau))(x) = ((\rho \circ \sigma) \circ \tau)(x).$$

2. **Existencia del elemento identidad:** El elemento identidad es la función identidad $\text{id}_X : X \rightarrow X$, pues «no hacer nada» preserva las propiedades de X y es invertible.
3. **Existencia de inversos:** Esto se cumple debido a que las simetrías son invertibles. \square

La notación $\text{Aut}(X)$ viene del término *automorfismo*, una palabra más técnica para referirse a lo que nosotros llamamos simetría. Respecto al ejemplo del triángulo equilátero, al grupo $\text{Aut}(\Delta)$ se le conoce como el *grupo diédrico* D_3 .

¹Por ejemplo, si X es un espacio topológico, la función inversa de una función continua biyectiva $\sigma : X \rightarrow X$ no es necesariamente continua; por lo tanto, las simetrías de X son funciones continuas biyectivas cuya inversa también es continua (llamadas *homeomorfismos* de X).

3. Simetrías del espacio

Para estudiar los grupos de simetría de estructuras moleculares es importante entender más a fondo cómo podemos representar las simetrías de objetos tridimensionales. Con esto en mente, consideremos el espacio euclídeo \mathbb{R}^3 , el cual consiste en triadas de números reales:

$$\mathbb{R}^3 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1, x_2, x_3 \in \mathbb{R}\}.$$

Nos interesa estudiar transformaciones de \mathbb{R}^3 que no alteren la distancia entre los puntos (ya que de otra forma, destruiríamos los enlaces químicos de la molécula) y que fijen un punto del espacio (como el centroide de la molécula, ya que de otra forma, simplemente trasladaríamos la molécula a otro lugar).

Recordemos que la distancia o métrica euclídea de \mathbb{R}^3 está dada por

$$d(x, y) = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + (x_3 - y_3)^2},$$

donde $x = (x_1, x_2, x_3)$, $y = (y_1, y_2, y_3) \in \mathbb{R}^3$. A las funciones biyectivas $T : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ que preservan la distancia, es decir, que satisfacen

$$d(x, y) = d(T(x), T(y)), \quad \text{para toda } x, y \in \mathbb{R}^3,$$

se les llama *isometrías* (del griego, «igual en medida»).

Sin perder generalidad, suponemos que el centroide de la molécula es el origen $(0, 0, 0) \in \mathbb{R}^3$. Por lo tanto, las simetrías de \mathbb{R}^3 que nos interesan son las isometrías $T : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ tales que $T(0, 0, 0) = (0, 0, 0)$. Aunque no es una tarea tan sencilla, es posible demostrar que estas isometrías siempre son *transformaciones lineales* [6, teo. 2.4].

Teorema 3.1. *Toda isometría $T : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que $T(0, 0, 0) = (0, 0, 0)$ es una transformación lineal, es decir, cumple que*

$$T(x + y) = T(x) + T(y) \quad y \quad T(\alpha x) = \alpha T(x),$$

para toda $x, y \in \mathbb{R}^3$ y $\alpha \in \mathbb{R}$.

Del álgebra lineal, sabemos que toda transformación lineal de \mathbb{R}^3 puede representarse como la multiplicación por una matriz de 3×3 con entradas en \mathbb{R} ; denotamos al conjunto de tales matrices por $M_{3 \times 3}(\mathbb{R})$. En otras palabras, para toda transformación lineal $T : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ existe $A \in M_{3 \times 3}(\mathbb{R})$ tal que

$$T(x) = Ax^t, \quad \text{para toda } x \in \mathbb{R}^3,$$

donde x^t es lo mismo que x pero escrito como vector columna. En este contexto, la composición de transformaciones lineales es equivalente a la multiplicación de las matrices correspondientes.

Por el teorema 3.1, toda isometría de \mathbb{R}^3 que fija el origen puede representarse por una matriz $A \in M_{3 \times 3}(\mathbb{R})$. Sin embargo, no todas las

matrices representarán una isometría. El siguiente teorema caracteriza esta situación [6, teo. 2.4].

Teorema 3.2. *Una matriz $A \in M_{3 \times 3}(\mathbb{R})$ representa una isometría que fija el origen si y solo si*

$$A^t A = I, \quad (1)$$

donde $I \in M_{3 \times 3}(\mathbb{R})$ es la matriz identidad y A^t es la matriz transpuesta, la cual se obtiene al reescribir las filas de A como columnas.

La condición (1) es equivalente a pedir que tanto las filas y columnas de A sean *vectores ortonormales*.² Una matriz A que satisface la condición (1) recibe el nombre de *matriz ortogonal*.

Teorema 3.3. *El conjunto de matrices ortogonales, denotado por*

$$O(3) := \{A \in M_{3 \times 3}(\mathbb{R}) : A^t A = I\},$$

junto con la multiplicación de matrices, es un grupo.

Demostración. Verificamos que $O(3)$ satisface todas las propiedades de la definición de grupo:

0. **Cerradura:** Sean $A, B \in O(3)$ matrices ortogonales, las cuales satisfacen que $A^t A = I$ y $B^t B = I$. Usando la propiedad de la transpuesta $(AB)^t = B^t A^t$, obtenemos que

$$(AB)^t(AB) = B^t(A^t A)B = B^t I B = B^t B = I.$$

Esto significa que $AB \in O(3)$.

1. **Asociatividad:** Del álgebra lineal, sabemos que la multiplicación de matrices es una operación asociativa.
2. **Existencia de la identidad:** El elemento identidad es la matriz identidad $I \in O(3)$, la cual claramente es una matriz ortogonal.
3. **Existencia de inversos:** La condición (1) implica que toda matriz $A \in O(3)$ es invertible, pues A^t es la matriz inversa de A . Alternativamente, si recordamos que $\det(A) = \det(A^t)$, podemos deducir una propiedad importante sobre el determinante de las matrices ortogonales:

$$\det(A^t A) = \det(I) = 1 \quad \Rightarrow \quad \det(A)^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad \det(A) = \pm 1.$$

En particular, $\det(A) \neq 0$, lo que implica que A es una matriz invertible. \square

El grupo $O(3)$ recibe el nombre de *grupo ortogonal en dimensión 3*. Un *subgrupo* de un grupo es un subconjunto H que contiene al elemento identidad, es cerrado bajo la operación, y cumple que el inverso de cualquier elemento de H pertenece a H . Al grupo ortogonal $O(3)$ y a sus

²Un conjunto de vectores $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ es ortonormal si el producto punto $v_i \cdot v_j = 0$ para toda $i \neq j$ y $v_i \cdot v_i = 1$ para toda i ; geoméricamente esto significa que son vectores unitarios y que forman un ángulo de 90° entre ellos.

subgrupos también se les conoce como *grupos puntuales en dimensión 3*, ya que consisten en isometrías que fijan un punto.

El grupo $O(3)$ contiene un tipo básico de simetría: rotaciones respecto a ejes que pasan por el origen. Por ejemplo, una rotación de un ángulo θ respecto al eje x está dada por la siguiente matriz ortogonal

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ 0 & \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}.$$

Podemos verificar fácilmente que esta matriz efectivamente cumple la condición (1) usando la identidad trigonométrica $\sin^2(\theta) + \cos^2(\theta) = 1$. Las matrices que representan rotaciones de ángulos respecto a los ejes y y z se pueden obtener de forma análoga, y las multiplicaciones entre estas matrices pueden representar una rotación general. Debido a que la composición de rotaciones es una rotación, y el inverso de una rotación es una rotación, el subconjunto de rotaciones de $O(3)$ forma un subgrupo el cual se denota³ como $SO(3)$. Resulta que toda rotación tiene determinante igual a 1, y que esta propiedad caracteriza al subgrupo de rotaciones:

$$SO(3) = \{A \in O(3) : \det(A) = 1\}.$$

Alternativamente, $SO(3)$ puede definirse como el grupo de isometrías de \mathbb{R}^3 que fijan el origen y preservan la *orientación* del espacio. Un resultado interesante es que cualquier simetría $A \in O(3)$ cumple una dicotomía: o A es una rotación, o $-A$ es una rotación⁴ (véase [7, p. 368]).

Además de las rotaciones, otras transformaciones notables en $O(3)$ son las *reflexiones*, las cuales pueden hacerse respecto a un punto, un eje o un plano que pase por el origen. La reflexión respecto al origen se llama *inversión* y está representada por la matriz

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Otro ejemplo es la reflexión a través del plano xy , la cual está representada por la siguiente matriz

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

³La notación $SO(3)$ viene del inglés *special orthogonal group*.

⁴En un lenguaje un poco más técnico, esto significa que el subgrupo $SO(3)$ de $O(3)$ tiene índice 2.

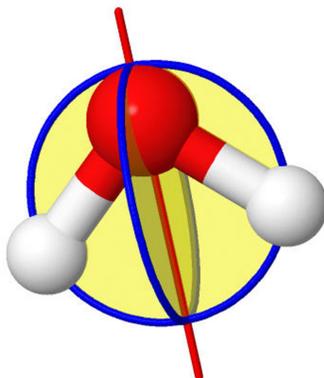


Figura 5. Simetrías de la molécula H_2O .

Una transformación que consiste en una rotación seguida de una reflexión recibe el nombre de *rotación impropia*. En general, toda transformación en $O(3)$ es una rotación o una rotación impropia.

4. Simetrías de moléculas

Matemáticamente, pensamos en una molécula M como una colección de puntos en \mathbb{R}^3 , donde cada punto tiene una etiqueta de acuerdo al tipo de átomo que le corresponde. De esta forma, toda simetría de M puede ser representada por una matriz ortogonal $A \in O(3)$ que transforme puntos de M a puntos de M con la misma etiqueta atómica. El grupo de simetrías de M , denotado por $\text{Aut}(M)$, pertenece a la familia de los grupos puntuales en dimensión 3, ya que siempre es un subgrupo de $O(3)$.

Como primer ejemplo, consideremos la molécula del agua H_2O formada por dos átomos de hidrógeno y un átomo de oxígeno. La geometría específica de esta molécula está dada en la figura 5. Dos simetrías del agua son la reflexión respecto al plano de la molécula y la reflexión respecto al plano que pasa por el átomo de oxígeno y es perpendicular al plano de la molécula; denotemos por σ_1 y σ_2 a estas dos reflexiones, respectivamente. Otra simetría del agua es la rotación ρ de 180° respecto al eje que pasa por el átomo de oxígeno y el centroide de la molécula; resulta que ρ es igual a las composiciones de σ_1 y σ_2 en cualquier orden:

$$\rho = \sigma_1 \circ \sigma_2 = \sigma_2 \circ \sigma_1.$$

La figura 5 muestra a la molécula del agua con sus tres simetrías no triviales.

Si consideramos a la simetría identidad I , vemos que el grupo de simetrías del agua tiene exactamente cuatro elementos, es decir:

$$\text{Aut}(H_2O) = \{I, \sigma_1, \sigma_2, \rho\}.$$

La *tabla de multiplicar*, también llamada *tabla de Cayley*, de un grupo finito $G = \{g_1, g_2, \dots, g_n\}$ es una tabla de $n \times n$ cuyas filas y columnas están etiquetadas por cada uno de los elementos del grupo, y la entrada (i, j) de la tabla tiene el resultado del producto $g_i \cdot g_j$. Para el caso del grupo $\text{Aut}(H_2O)$, la tabla de multiplicar es la siguiente:

	I	σ_1	σ_2	ρ
I	I	σ_1	σ_2	ρ
σ_1	σ_1	I	ρ	σ_2
σ_2	σ_2	ρ	I	σ_1
ρ	ρ	σ_2	σ_1	I

Usando la tabla de multiplicar, podemos verificar que $\text{Aut}(H_2O)$ es un grupo abeliano.

En teoría de grupos, decimos que dos grupos G_1 y G_2 son *isomorfos* (del griego, «misma forma»), y escribimos $G_1 \cong G_2$, si la operación de G_1 se comporta de la misma forma que la operación de G_2 , salvo un reetiquetamiento de los elementos. Para grupos finitos, esto significa que las tablas de multiplicar de G_1 y G_2 serán las mismas si reetiquetamos a los elementos de forma adecuada. Por ejemplo, sean $G_1 = \{I, a, b\}$ y $G_2 = \{I, x, y\}$ grupos con las siguientes tablas de multiplicar

	I	a	b		I	x	y
I	I	a	b	I	I	x	y
a	a	b	I	x	x	y	I
b	b	I	a	y	y	I	x

Aplicando el reetiquetamiento $I \mapsto I, a \mapsto x, b \mapsto y$, podemos ver que las tablas anteriores son idénticas, lo que significa que los grupos G_1 y G_2 son isomorfos.

El grupo $\text{Aut}(H_2O)$ es isomorfo al grupo

$$\mathbb{Z}_2 \oplus \mathbb{Z}_2 = \{(0, 0), (1, 0), (0, 1), (1, 1)\}$$

dado por la siguiente tabla de multiplicar

	$(0, 0)$	$(1, 0)$	$(0, 1)$	$(1, 1)$
$(0, 0)$	$(0, 0)$	$(1, 0)$	$(0, 1)$	$(1, 1)$
$(1, 0)$	$(1, 0)$	$(0, 0)$	$(1, 1)$	$(0, 1)$
$(0, 1)$	$(0, 1)$	$(1, 1)$	$(0, 0)$	$(1, 0)$
$(1, 1)$	$(1, 1)$	$(0, 1)$	$(1, 0)$	$(0, 0)$

el cual es conocido como el *grupo de Klein*. Se deja como un ejercicio sencillo para el lector encontrar un reetiquetamiento de los elementos

de $\text{Aut}(H_2O)$ para obtener la misma tabla de multiplicar del grupo $\mathbb{Z}_2 \oplus \mathbb{Z}_2$.

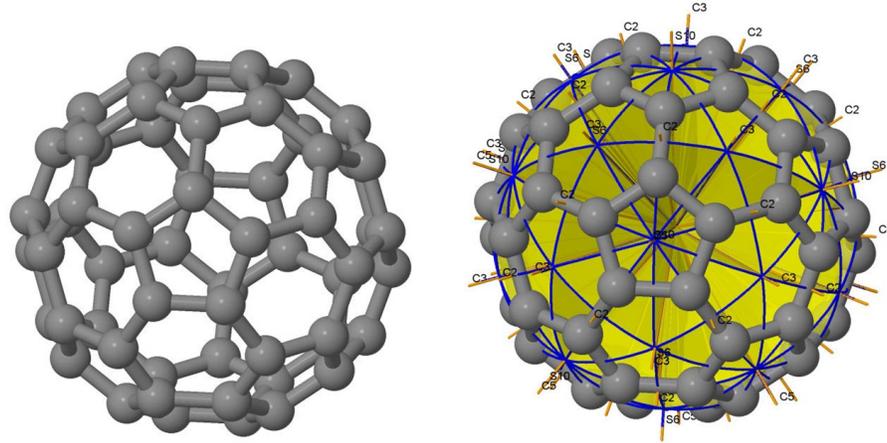


Figura 6. Buckminsterfullereno C_{60} .

En contraste con el ejemplo anterior, existen moléculas con grupos de simetrías mucho más complejos. En 1985, Harold Kroto, Robert Curl, Richard Smalley, junto con otros científicos de la Universidad de Rice, descubrieron el *buckminsterfullereno*⁵ C_{60} , una molécula compuesta por 60 átomos de carbono en una configuración de *icosaedro*⁶ *truncado* (figura 6). Esta molécula tiene muchas propiedades químicas y físicas excepcionales relacionadas con su estabilidad, su dureza, su capacidad de absorber la luz, etc. En 1996, Kroto, Curl y Smalley obtuvieron el Premio Nobel de Química por su descubrimiento del buckminsterfullereno y la familia relacionada de moléculas llamadas simplemente *fullerenos*. La historia y descripción de los fullerenos puede consultarse en el artículo de divulgación [10].

El grupo de simetría del buckminsterfullereno C_{60} es un grupo con 120 elementos al cual los químicos denotan como \mathbf{I}_h , pero es isomorfo al *grupo simétrico* S_5 , el cual consiste en todas las permutaciones (o funciones biyectivas) del conjunto $\{1, 2, 3, 4, 5\}$. El grupo de rotaciones de C_{60} es isomorfo al *grupo alternante* A_5 , el cual consiste en todas las permutaciones *pares*⁷. Así como la molécula C_{60} tiene propiedades excepcionales, su grupo de rotaciones A_5 también es conocido por ser un grupo extraordinario: resulta ser el grupo *simple* no abeliano más

⁵El nombre de esta molécula es un homenaje al arquitecto estadounidense Buckminster Fuller, quien fue famoso por sus cúpulas en forma de icosaedro.

⁶Recordemos que un icosaedro es un sólido regular con 20 caras.

⁷Una permutación es par si puede descomponerse como un número par de *transposiciones*, o intercambios entre dos números.

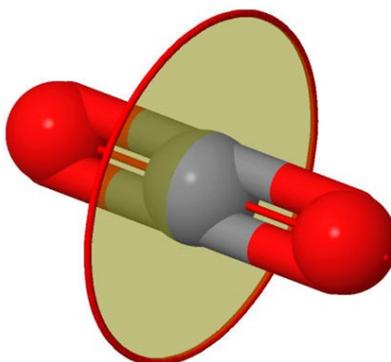


Figura 7. Simetrías de la molécula CO_2 .

pequeño que existe. A grandes rasgos, los grupos simples pueden pensarse como los bloques constructores indivisibles que constituyen a los demás grupos; en cierta forma, podemos decir que los grupos simples son los «átomos de la simetría» [14, cap. 8]. Sorprendentemente, las características excepcionales de A_5 están ligadas al hecho de que no existe una fórmula general para resolver ecuaciones de grado 5 o superior a través de la teoría de Galois (véase [13, cap. 7] o [12]).

Aunque la mayoría de los grupos de simetría de moléculas tienen una cantidad finita de elementos, las moléculas *lineales* poseen un número infinito de simetrías. Tal es el caso del dióxido de carbono CO_2 (figura 7), pues cualquier rotación respecto al eje que atraviesa la molécula es una simetría. El grupo de simetrías del CO_2 se denota por $D_{\infty h}$, y es isomorfo al grupo de simetría de un cilindro ideal [5, p. 40].

Los químicos clasifican los grupos puntuales de moléculas usando la notación introducida por el matemático alemán Arthur Moritz Schoenflies, la cual captura muchos detalles de las simetrías de la molécula como la existencia de rotaciones, de rotaciones impropias, de ejes y planos de simetría; los pormenores de la notación se pueden consultar en libros como [1, §6], [9, §3] y [2, §3].

El cuadro 1 pretende ser un breve diccionario entre la notación de Schoenflies y la notación usada actualmente por los matemáticos en teoría de grupos. Sin embargo, dicho diccionario no es para nada exhaustivo, pues la notación de Schoenflies utiliza subíndices para indicar la existencia de simetrías adicionales, las cuales modifican al grupo puntual. Por ejemplo, el grupo \mathbf{T}_d resulta isomorfo al grupo simétrico S_4 , mientras que el grupo \mathbf{T}_h resulta isomorfo a la suma directa $\mathbb{Z}_2 \oplus A_4$. El diccionario más completo que pudimos encontrar aparece en la página

de Wikipedia⁸ «*List of character tables for chemically important 3D point groups*».

Nombre	Símbolo	Tamaño	Notación matemática común
Grupos cíclicos	C_n	$n \geq 2$	\mathbb{Z}_n
Grupos diédricos	D_n	$2n, n \geq 2$	D_{2n}
Grupo tetraédrico	T	12	Grupo alternante A_4
Grupo octaédrico	O	24	Grupo simétrico S_4
Grupo icosaédrico	I	60	Grupo alternante A_5

Cuadro 1. Notación de Schoenflies para grupos puntuales.

Existen diversos programas computacionales para visualizar y calcular los grupos de simetría de moléculas. Para la elaboración de este artículo, usamos el programa *open-source* Jmol [8].

Con ayuda de herramientas más sofisticadas, como la *tabla de caracteres* de las *representaciones irreducibles* de los grupos de simetría, es posible analizar y predecir el comportamiento de las moléculas, por ejemplo, respecto a sus vibraciones ([7, cap. 32]). La idea principal consiste en representar a los grupos de simetría como grupos de matrices en dimensiones más pequeñas (muchas veces unidimensionales) y aplicar conceptos del álgebra lineal como la *traza* (i.e., la suma de los elementos de la diagonal de la matriz) para capturar propiedades del grupo. Sin embargo, estas herramientas quedan fuera del alcance de este artículo, y se dejan para un trabajo futuro.

Bibliografía

- [1] S. L. Altmann y P. Herzig, *Point-group theory tables*, Oxford University Press, 1994.
- [2] D. M. Bishop, *Group theory and chemistry*, Dover Publications, Inc., 1993.
- [3] A. Castillo Pérez, A. Castillo Ramírez, E. de la Cruz García y A. Hernández Magdaleno, *Conjuntos y números*, Editorial Universitaria, Universidad de Guadalajara, 2014.
- [4] A. Castillo Ramírez, *Un curso en teoría de grupos*, Serie Textos, Vol. 23, Publicaciones Electrónicas, Sociedad Matemática Mexicana, 2021.
- [5] A. J. Ceulemans, *Group theory applied to chemistry*, Springer Science & Business Media, 2013.
- [6] K. Conrad, «Isometries of \mathbb{R}^n », Accesado: 22/02/2023. Disponible en: <https://kconrad.math.uconn.edu/blurbs/>.
- [7] G. James y M. W. Liebeck, *Representations and characters of groups*, Cambridge University Press, 2001.
- [8] Jmol development team, «Jmol Software», Disponible en: <http://jmol.sourceforge.net/>.
- [9] M. Ladd, *Symmetry and group theory in chemistry*, Elsevier, 1998.

⁸Accesado: 13/02/2023. Disponible en: https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_character_tables_for_chemically_important_3D_point_groups.

- [10] A. Pénicaud, «El buckminsterfullereno y sus hermanos los fullerenos», *Educación Química*, vol. 6, núm. 1, 1991, 36–43.
- [11] R. B. Shirts, «Correcting two long-standing errors in point group symmetry character tables», *Journal of Chemical Education*, vol. 84, núm. 11, 2007, 1882, <http://doi.org/10.1021/ed084p1882>.
- [12] I. Stewart, *Galois theory*, Chapman and Hall/CRC, 1990.
- [13] ———, *Why beauty is truth: a history of symmetry*, Basic Books, 2008.
- [14] ———, *Symmetry: A very short introduction*, OUP Oxford, 2013.