

Simetría y Degeneración: partícula atrapada en una caja cúbica con paredes impenetrables

A.O. Hernández-Castillo y R. Lemus

*Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México
Apartado Postal 70-543, Circuito Exterior, C.U., 04510 México, D.F., Mexico.*

Received 4 July 2014; accepted 3 March 2015

La importancia de la simetría es ampliamente reconocida tanto en el campo de la física como en el de la química. En particular se sabe que en el dominio de sistemas lineales, la degeneración de los sistemas está estrechamente relacionada con la simetría; la degeneración de un estado estacionario corresponde a la dimensión de una de las representaciones irreducibles del grupo de simetría. La importancia de identificar el grupo de simetría es por lo tanto fundamental para el etiquetado de los estados propios del sistema. En ocasiones el espectro presenta degeneración accidental sistemática, hecho que indica que el grupo de simetría supuesto es en realidad un subgrupo. Esta situación se presenta, por ejemplo, en el átomo de hidrógeno no relativista, pero también en el caso de una partícula atrapada en una caja cúbica con paredes infinitas. En esta contribución se presenta un procedimiento que permite identificar el grupo de simetría que explica la degeneración del sistema de una partícula en una caja. Siguiendo dicho procedimiento se presentan ejemplos para ilustrar los conceptos involucrados, así como las consecuencias de identificar erróneamente el grupo de simetría para el cálculo de las reglas de selección.

Descriptor: Simetría; degeneración; caja cúbica; reglas de selección.

In physics as well as in chemistry the importance of symmetry is widely acknowledged. It is of common knowledge that the systems' degeneracy, in the domain of linear physical systems, is tightly related with symmetry. The stationary state degeneracy should correspond with the dimension of the symmetry group irreducible representations (irreps) associated. Therefore identifying the symmetry group is essential for labeling the energy levels. Sometimes the spectrum presents systematic accidental degeneracy, which means that the supposed symmetry group is actually a subgroup. This is the case for a particle in a cubic box, with impenetrable walls. This article presents the procedure that allows the identification of the new symmetry group that explains the degeneracy. Furthermore examples to illustrate the concepts are presented as well as the consequences implied in the selection rules.

Keywords: Symmetry; degeneracy; cubic well potential; selection rules.

PACS: 02.20.-a; 03.65.-w

1. Introducción

El papel preponderante que la simetría juega en la física es ampliamente reconocido. La herramienta para su descripción es la teoría de representaciones de grupos, la cual se ha convertido en un ingrediente fundamental en el lenguaje de la física subnuclear, nuclear, atómica, molecular y de espacio-tiempo [1-8]. El análisis de la simetría repercute directamente en dos aspectos de la descripción del sistema. Por una parte permite identificar los números cuánticos, y por la otra conduce a una simplificación importante en los cálculos de estructura. El primer aspecto tiene consecuencias directas sobre el análisis de las reglas de selección, es decir, sobre la probabilidad de que una transición de un estado a otro sea permitida. Sin embargo, para que el análisis de simetría sea confiable es necesario establecer con certeza el grupo de simetría, puesto que las representaciones irreducibles determinan los números cuánticos [9]. Es posible reconocer cuándo se ha identificado correctamente el grupo de simetría a través del análisis de la degeneración.

El análisis usual del espectro establece que la degeneración existente está directamente relacionada con la simetría del sistema [10]. Esto queda establecido a través del teorema de Wigner [2]. Si $\hat{\mathcal{H}}$ es el Hamiltoniano del sistema, el grupo de simetría G está constituido por el conjunto de transforma-

ciones R , cuyos operadores respectivos \hat{O}_R conmutan con el Hamiltoniano

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}_R] = 0; \quad \forall R \in G. \quad (1)$$

Si tomamos en cuenta esta definición en la ecuación de Schrödinger para estados estacionarios con degeneración g_α

$$\hat{\mathcal{H}}|\Psi_i^\alpha\rangle = E_\alpha|\Psi_i^\alpha\rangle; \quad i = 1, 2, \dots, g_\alpha, \quad (2)$$

obtenemos que

$$\hat{O}_R \hat{\mathcal{H}} |\Psi_i^\alpha\rangle = \hat{\mathcal{H}} \hat{O}_R |\Psi_i^\alpha\rangle = E_\alpha \hat{O}_R |\Psi_i^\alpha\rangle, \quad (3)$$

lo cual quiere decir que los estados transformados $\hat{O}_R |\Psi_i^\alpha\rangle$ son eigenestados del sistema con la misma energía. Puesto que la energía define un subespacio vectorial, se sigue que

$$\hat{O}_R |\Psi_i^\alpha\rangle = \sum_{j=1}^{g_\alpha} D_{ji}(R) |\Psi_j^\alpha\rangle. \quad (4)$$

El conjunto de matrices $\{\mathbf{D}(R); R \in G\}$ así definidas constituyen una representación matricial del grupo [2,5,6]:

$$\mathbf{D}^{(\mu)}(R)\mathbf{D}^{(\mu)}(S) = \mathbf{D}^{(\mu)}(RS); \quad \forall R, S \in G, \quad (5)$$

donde hemos etiquetado la representación como la μ -ésima con el propósito de hacer explícito el hecho de que en general hay varias irreps. Si el grupo de simetría es el correcto,

es decir, es un conjunto maximal, entonces las representaciones en (5) son irreducibles para toda energía, lo que significa que no es posible redefinir las funciones degeneradas como combinación lineal de las originales de tal forma que formen subespacios invariantes de menor dimensión. En contraste, si el grupo propuesto es sólo un subgrupo del verdadero grupo de simetría, subconjuntos de estados de la misma energía forman subespacios invariantes bajo las transformaciones del grupo supuesto. En dicho caso las representaciones (5) son reducibles. Esto implica la aparición de una degeneración accidental sistemática.

Así pues, cuando se manifiesta una degeneración entre estados asociados a diferente representación irreducible (irrep) se dice que se presenta degeneración accidental [10]. Si la degeneración accidental resulta ser sistemática entonces de acuerdo con la experiencia el grupo que se creía de simetría es sólo un subgrupo, y es de esperarse que exista un grupo de mayor dimensión con respecto al cual la degeneración resulta ser normal.

Respecto a lo antes expuesto hay varias consideraciones por tomar en cuenta. Las representaciones (5) pertenecen al caso particular de representaciones vectoriales, las cuales se generan con funciones escalares. Cuando se consideran funciones vectoriales, como las espinoriales, las representaciones resultantes son proyectivas [11]. La degeneración también puede deberse a la aparición de la simetría conocida como “Time Reversal”, cuyo operador asociado es antilineal y consiste en invertir el tiempo y conjugar la función de onda [12]. Por otra parte, la Ec. (1), junto con el teorema de Kramer, podría no ser suficiente para explicar la degeneración emergente. Esto es debido a que la aplicación de los grupos de Lie y sus álgebras se restringen a sistemas lineales. En el ámbito no lineal la maquinaria desarrollada deja de ser válida y las álgebras deformadas adquieren relevancia [13]. Asimismo, la degeneración podría no deberse a la aparición de una simetría, en cuyo caso se buscaría su explicación con argumentos de la misma teoría cuántica [14].

El átomo de hidrógeno no relativista es por antonomasia el sistema que presenta degeneración accidental sistemática aparente [16]. En este caso la simetría esférica del potencial sugiere al grupo de rotaciones $SO(3)$ como el grupo de simetría basado en la geometría esférica de las superficies equipotenciales. En este sistema la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$\hat{H}|nlm\rangle = E_n|nlm\rangle, \tag{6}$$

donde n es el número cuántico principal, mientras que l, m es el momento angular y su proyección, respectivamente. Las representaciones irreducibles del grupo de rotaciones están etiquetadas con el momento angular, de tal forma que

$$\hat{O}_R|nlm\rangle = \sum_{m'}^{2l+1} D_{m'm}^{(l)}(R)|nlm'\rangle; \quad \forall R \in SO(3), \tag{7}$$

donde l (momento angular) define subespacios invariantes de dimensión $2l + 1$. Sin embargo la energía sólo depende del número cuántico principal, de tal forma que

hay varios momentos angulares asociados a cada energía: $l = 0, 1, \dots, n - 1$. Si el grupo de simetría fuera realmente $SO(3)$ esperaríamos que todas las funciones asociadas a la misma energía se mezclaran bajo rotaciones para generar una sola matriz $\mathbf{D}^{(n)}(R)$. En contraste, encontramos n momentos angulares (irreps) asociadas a la misma energía. Esto es lo que se conoce como degeneración accidental sistemática, pues se presenta para toda energía diferente de $n = 1$.

Para establecer el grupo completo de simetría en su momento se recurrió al problema de Kepler en mecánica clásica [17], en donde dado el potencial $V(r) = k/r$ se identifica al momento angular junto con el vector de Laplace-Runge-Lenz

$$\mathbf{A} = \mathbf{p} \times \mathbf{L} - \frac{mk\mathbf{r}}{r}, \tag{8}$$

como constantes de movimiento:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \frac{d\mathbf{A}}{dt} = 0. \tag{9}$$

La simetrización del vector \mathbf{A} se cuantiza, y junto con los componentes de momento angular generan el grupo $SO(4)$ de rotaciones en cuatro dimensiones [16,18]. De esta forma los estados que aparentaban estar degenerados accidentalmente, lo están en realidad en forma natural a través de las rotaciones tetradimensionales que conectan los estados con diferente momento angular para un número cuántico principal dado [19]. Así pues, si $T \in SO(4)$, entonces una transformación general toma la forma

$$\hat{O}_T|nlm\rangle = \sum_{l'm'} D_{l'm';lm}^{(n)}(T)|nl'm'\rangle. \tag{10}$$

Como puede apreciarse las transformaciones del nuevo grupo mezclan todas las funciones degeneradas permitiendo identificar sin ambigüedad al grupo de simetría como $SO(4)$.

El potencial trigonométrico de Scarf presenta una degeneración del mismo tipo que el átomo de hidrógeno [14,15]. Para valores discretos de uno de sus parámetros la simetría $SO(4)$ aparece con claridad. Sin embargo esta conexión desaparece para valores continuos de ese mismo parámetro, aún cuando la degeneración se mantiene. Esto representa un ejemplo de la falta de generalidad de la explicación de la degeneración a través del teorema de Wigner.

El problema de una partícula atrapada en una caja con paredes infinitas es similar al átomo de hidrógeno desde el punto de vista del análisis de la simetría. En este caso la simetría obvia es \mathcal{O}_h (simetría del cubo), mientras que el análogo del vector de Laplace-Runge-Lenz resulta ser un operador diferencial (combinación lineal de los cuadrados de los momentos asociados a las diferentes coordenadas cartesianas). En esta contribución presentaremos un procedimiento para afrontar el problema de degeneración accidental y la consecuente identificación del grupo de simetría, siguiendo las ideas presentadas en el análisis del caso bidimensional [20]. Nos centraremos en el problema de la partícula atrapada en una caja cúbica con paredes infinitas, sistema menospreciado por su simplicidad, pero de gran riqueza desde el punto

de vista de la simetría. Posteriormente ilustraremos la misma idea de degeneración sistemática en forma abstracta, al considerar la cadena de grupos puntuales $\mathcal{T} \supset \mathcal{D}_2$. Asimismo haremos notar que la identificación correcta del grupo de simetría es fundamental para el correcto análisis de las reglas de selección.

2. Partícula en una caja cúbica

Uno de los sistemas más simples en mecánica cuántica analizado en libros de texto es el de partícula en una caja con paredes impenetrables. Si consideramos la caja con lados a , b y c , y masa μ , los valores propios del sistema están dados por [21]:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right) \quad (11)$$

con estados propios

$$\langle \mathbf{r} | \Psi_{n_1 n_2 n_3} \rangle = \psi_{n_1}(x) \psi_{n_2}(y) \psi_{n_3}(z), \quad (12)$$

y componentes unidimensionales

$$\begin{aligned} \psi_{n_1}(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right); \\ \psi_{n_2}(y) &= \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right); \\ \psi_{n_3}(z) &= \sqrt{\frac{2}{c}} \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right). \end{aligned} \quad (13)$$

Estas funciones se anulan en las paredes, satisfaciendo así las condiciones a la frontera referidas al origen O en la Fig. 1. El sistema puede presentar tres tipos de degeneración, a saber:

- a) *Degeneración geométrica.* Cuando dos o más lados son iguales.
- b) *Degeneración por conmensurabilidad.* Cuando al menos un lado de la caja es múltiplo de otro.

- c) *Degeneración pitagórica.* En el caso de la caja cúbica por ejemplo ($a=b=c$), cuando se satisface que $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = n_1'^2 + n_2'^2 + n_3'^2$, donde la relación entre \mathbf{n} y \mathbf{n}' no es una simple permutación de índices.

En esta contribución nos abocaremos al análisis de la degeneración de tipo (a), cuando $a=b=c$, condición que corresponde a una caja cúbica. Este sistema presenta tres tipos de subespacios con funciones degeneradas. El primer subespacio $\mathcal{L}_1 = \{|\Psi_{nnn}\rangle\}$ es unidimensional y corresponde al caso $n_1 = n_2 = n_3 = n$. Cuando dos de los números cuánticos son iguales ($n_1 = n_2 = n, n_3 = m$) se tiene un subespacio tridimensional dado por $\mathcal{L}_3 = \{|\Psi_{nnm}\rangle, |\Psi_{nmm}\rangle, |\Psi_{mnn}\rangle\}$, correspondiente a las tres posiciones posibles del número cuántico diferente m . Por último, cuando todos los números cuánticos son distintos se tiene un subespacio hexadimensional definido por las seis posibles permutaciones de tres símbolos, $\mathcal{L}_6 = \{|\Psi_{n_1 n_2 n_3}\rangle\}; n_1 \neq n_2 \neq n_3$. Debido a que los estados de cada uno de estos subespacios están conectados sólo con permutaciones, las degeneraciones posibles son 1, 3 y 6 [21].

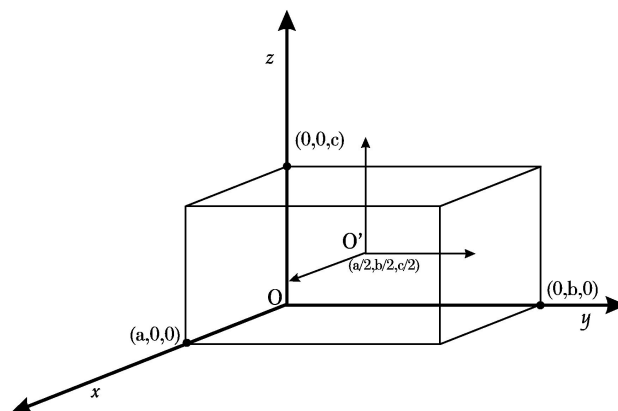


FIGURA 1. Caja de tres dimensiones con paredes impenetrables. El origen O asociado con la función de onda está desplazado del origen O' donde los elementos de simetría convergen.

TABLA I. Tabla de caracteres del grupo puntual O_h . En la segunda fila se indica el número de clase K_i asignada.

O_h	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6C'_2$	I	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6S_4$	$6\sigma_d$	
	K_1	K_2	K_3	K_4	K_5	K_6	K_7	K_8	K_9	K_{10}	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	
E_g	2	-1	2	0	0	2	-1	2	0	0	$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
T_{1g}	3	0	-1	1	-1	3	0	-1	1	-1	
T_{2g}	3	0	-1	-1	1	3	0	-1	-1	1	(xz, yz, xy)
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	
E_u	2	-1	2	0	0	-2	1	-2	0	0	
T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	0	1	-1	1	
T_{2u}	3	0	-1	-1	1	-3	0	1	1	-1	

TABLA II. Descomposición de los subespacios degenerados asociados a la partícula de una caja cúbica de paredes impenetrables. Se muestran explícitamente las representaciones irreducibles de O_h contenidas en los subespacios degenerados. Asimismo en la quinta columna se despliegan los productos directos de la representación E_g con las representaciones involucradas en la reducción del subespacio [22].

Dimensión	Paridad	Condición	Representación	Producto directo
1 (nnn)	$n = 2p$	$n_x = n_y = n_z$	A_{2u}	
	$n = 2p + 1$		A_{1g}	
3 (nnm)	$n = 2p$	$n_x = n_y \neq n_z$	$A_{2u} \oplus E_u$	$A_{2u} \otimes E_g = E_u$
	$m = 2p$	$n_x = n_z \neq n_y$		
		$n_y = n_z \neq n_x$		
	$n = 2p + 1$		$A_{1g} \oplus E_g$	$A_{1g} \otimes E_g = E_g$
	$m = 2p + 1$			
	$n = 2p$		T_{2g}	
	$m = 2p + 1$		T_{1u}	
6 (nml)	$n = m = l = 2p$	$n_x \neq n_y \neq n_z$	$A_{1u} \oplus A_{2u} \oplus 2E_u$	$E_g \otimes E_u = A_{1u} \oplus A_{2u} \oplus E_u$
	$n = m = l = 2p + 1$		$A_{1g} \oplus A_{2g} \oplus 2E_g$	$E_g \otimes E_g = A_{1g} \oplus A_{2g} \oplus E_g$
	$n = m = 2p$		$T_{1g} \oplus T_{2g}$	$E_g \otimes T_{1g} = T_{1g} \oplus T_{2g}$
	$l = 2p + 1$			
	$n = m = 2p + 1$		$T_{1u} \oplus T_{2u}$	$E_g \otimes T_{1u} = T_{1u} \oplus T_{2u}$
	$l = 2p$			

La simetría geométrica del sistema corresponde a la simetría del cubo cuyo grupo puntual es O_h , y cuya tabla de caracteres se presenta en la Tabla I [22,23]. De acuerdo con esta tabla el mayor grado de degeneración posible es tres. Es por lo tanto evidente que la degeneración hexadimensional que aparece en el subespacio \mathcal{L}_6 no puede ser explicada por el grupo de simetría O_h . Consecuentemente deben existir transformaciones que conecten los subespacios irreducibles de O_h asociados con el conjunto de estados accidentalmente degenerados. Siguiendo la analogía con el átomo de hidrógeno, el grupo O_h corresponde al grupo $SO(3)$, de tal forma que al considerar al grupo octahédrico aparece degeneración accidental sistemática, como se puede apreciar en la Fig. 2. Por ejemplo, los estados asociados al subespacio $\mathcal{L}_3 = \{|\Psi_{113}\rangle, |\Psi_{131}\rangle, |\Psi_{311}\rangle\}$ al proyectarse se reducen a los estados $|\Psi_{(113)}^{A_{1g}}\rangle$ y $|\Psi_{(113)}^{E_g}\rangle$, los cuales portan irreps A_{1g} y E_g del grupo O_h . Como estos vectores con irreps diferentes tienen la misma energía, presentan degeneración accidental. En la Fig. 2 la degeneración accidental se resalta en recuadros. Como esta situación hace su presencia en forma sistemática, se deduce que el grupo octahédrico es solamente un subgrupo. Debemos por lo tanto identificar al grupo de simetría que conecte los estados degenerados con diferente irrep. La tarea consiste en identificar al operador análogo al vector de Laplace-Runge-Lenz en el átomo de hidrógeno. Cabe mencionar que si bien aquí es evidente la existencia de degeneración accidental por la aparición del subespacio hexadi-

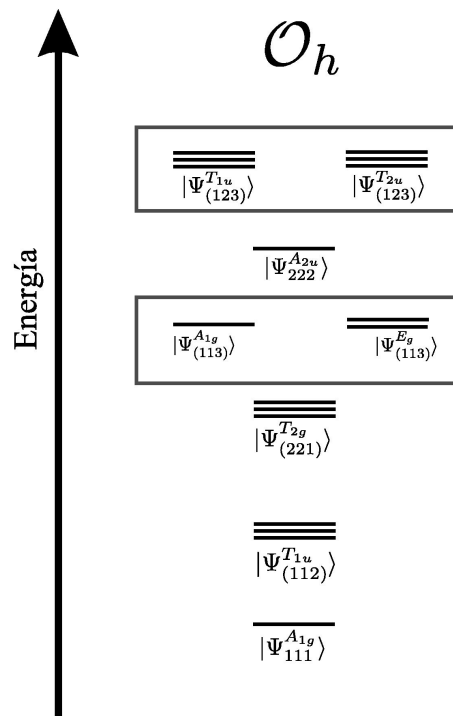


FIGURA 2. Espectro de una partícula atrapada en una caja con paredes impenetrables. Sólo cuando los estados se etiquetan con las representaciones irreducibles del grupo se puede conjeturar la existencia de degeneración accidental.

dimensional, en general es necesario proyectar, para después analizar la degeneración desde el punto de vista de las irreps del grupo de simetría propuesto. Esto se aprecia en la misma Fig. 2. Más allá del caso obvio de degeneración hexadimensional, la degeneración accidental sistemática se detecta en la reducción de los subespacios tridimensionales cuando los números cuánticos involucrados tienen la misma paridad, lo cual se aprecia en la Tabla II. En esta Tabla II se muestra la reducción de los subespacios en representaciones irreducibles. En la cuarta columna de esta tabla se ve la aparición de la degeneración accidental más allá del caso trivial del espacio hexadimensional. Así pues las reducciones $A_{2u} \oplus E_u$ y $A_{1g} \oplus E_g$ en el espacio tridimensional manifiestan la degeneración accidental al proponer a \mathcal{O}_h como grupo de simetría. De igual manera, las reducciones $A_{1u} \oplus A_{2u} \oplus 2E_u$, $A_{1g} \oplus A_{2g} \oplus 2E_g$, $T_{1g} \oplus T_{2g}$ y $T_{1u} \oplus T_{2u}$, manifiestan la degeneración accidental en los subespacios hexadimensionales.

Como veremos, en el caso de una partícula atrapada en una caja el nuevo grupo de simetría contiene transformaciones continuas y discretas (subgrupo octaédrico), característica que vuelve la búsqueda una tarea no trivial [24]. Nos enfocaremos en deducir las transformaciones que conectan los subespacios de diferentes representaciones irreducibles de \mathcal{O}_h , para de esta forma mostrar el procedimiento para identificar el grupo de simetría, aunque no construiremos las representaciones irreducibles del nuevo grupo debido a la complejidad del problema [24].

El primer paso consiste en identificar el operador u operadores que conectan los subespacios degenerados portadores de irreps de \mathcal{O}_h . Para ello identificaremos la representación irreducible que conectan los estados degenerados en forma accidental. Esto se puede ver partiendo de la propiedad de ortogonalidad [5,23]:

$$I = \langle \Phi_{\gamma'}^{(\Gamma')} | \Psi_{\gamma}^{(\Gamma)} \rangle = \mathcal{V}(\Gamma) \delta_{\Gamma\Gamma'} \delta_{\gamma\gamma'}, \quad (14)$$

donde Γ y Γ' son representaciones irreducibles del grupo, mientras γ y γ' son las respectivas componentes. Aquí $\mathcal{V}(\Gamma)$ es un término que sólo depende de Γ , pero es independiente de las componentes. La expresión (14) puede reinterpretarse de la siguiente forma: la integral I se anula a menos que el integrando tenga una componente totalmente simétrica, lo que se puede apreciar identificando a $|\Phi_{\gamma'}^{(\Gamma')}\rangle$ con una constante [2,5,23]. Así pues, sólo cuando $\Gamma = \Gamma'$ el integrando tiene una componente invariante.

Veamos ahora la integral que involucra elementos de matriz de un operador $\widehat{F}_i^{(\rho)}$ que porta la ρ -ésima representación irreducible:

$$I_F = \langle {}_{q'}\Phi_{\gamma'}^{(\Gamma')} | \widehat{F}_i^{(\rho)} | {}_q\Psi_{\gamma}^{(\Gamma)} \rangle. \quad (15)$$

Esta integral es diferente de cero sólo si $\Gamma' \in \rho \otimes \Gamma$, ya que sólo así el integrando contiene una componente totalmente simétrica. Esto se puede ver al identificar el vector

$\widehat{F}_i^{(\rho)} | {}_q\Psi_{\gamma}^{(\Gamma)} \rangle$ como un nuevo vector que porta la representación producto directo $\rho \otimes \Gamma$ [2,5,23]:

$$\begin{aligned} \widehat{O}_R \widehat{F}_i^{(\rho)} | {}_q\Psi_{\gamma}^{(\Gamma)} \rangle &= \widehat{O}_R \widehat{F}_i^{(\rho)} \widehat{O}_R^\dagger \widehat{O}_R | {}_q\Psi_{\gamma}^{(\Gamma)} \rangle \\ &= \sum_{j\gamma'} D_{ji}^{(\rho)}(R) D_{\gamma'\gamma}^{(\Gamma)}(R) \widehat{F}_j^{(\rho)} | {}_q\Psi_{\gamma'}^{(\Gamma)} \rangle \\ &= \sum_{j\gamma'} \Delta_{j\gamma';i\gamma}^{(\rho \otimes \Gamma)}(R) \widehat{F}_j^{(\rho)} | {}_q\Psi_{\gamma'}^{(\Gamma)} \rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Siguiendo el razonamiento anterior, sólo cuando Γ' este contenida en este producto directo habrá una componente totalmente simétrica, de ahí el resultado previamente mencionado.

De la quinta columna de la Tabla II, se puede observar que se debe satisfacer $\rho = E_g$, ya que E_g resulta ser la representación irreducible que conecta todas las representaciones irreducibles accidentalmente degeneradas. Así pues, para cualquier par de estados degenerados $|\Psi_{\alpha}^{(\Gamma')}\rangle, |\Psi_{\beta}^{(\Gamma')}\rangle$, la condición

$$\Gamma' \in E_g \otimes \Gamma \quad (17)$$

se satisface. Por otra parte, de la Tabla I vemos que los armónicos cartesianos que portan la representación E_g son:

$$\begin{aligned} Y_{\cos 2\phi}^2(\mathbf{r}) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \frac{(x'^2 - y'^2)}{r^2}, \\ Y_0^2(\mathbf{r}) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \frac{(2z'^2 - x'^2 - y'^2)}{r^2}, \end{aligned} \quad (18)$$

donde las coordenadas x', y', z' están referidas al origen O' mostrado en la Fig. 1. Estas funciones están asociadas a los orbitales $d_{x^2-y^2}$ y d_{z^2} , respectivamente. En nuestro caso, sin embargo, estas funciones por sí mismas no son relevantes, como a continuación se argumenta. Estamos interesados, en funciones u operadores con respecto al origen O . Este problema de sistema de referencia desaparece al percatarnos que la componente unidimensional del momento es independiente del origen, y por lo tanto se pueden proponer los siguientes operadores

$$\begin{aligned} \widehat{F}_1^{(E_g)} &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right); \\ \widehat{F}_2^{(E_g)} &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right), \end{aligned} \quad (19)$$

como candidatos al operador $\widehat{F}_i^{(\rho)}$ que conecta los estados. Hemos de hacer notar que las expresiones (19) son en realidad combinaciones lineales de Hamiltonianos unidimensionales que conmutan con el Hamiltoniano mismo [25]. Esta es precisamente la condición (junto con el hecho de que deben de preservar las condiciones a la frontera) para que una transformación forme parte del grupo de simetría [11], de tal forma que los operadores diferenciales (19) pueden considerarse como los generadores de un subgrupo continuo que forma parte del grupo de simetría completo [20]. Pero antes de hacer la identificación correspondiente veremos una forma de demostrar que los operadores (19) efectivamente conectan los estados accidentalmente degenerados. Para ello

vamos a desarrollar en forma detallada el ejemplo de los estados $|\Psi^{(A_{2u})}\rangle, |\Psi_\alpha^{(E_u)}\rangle$ asociados al subespacio tridimensional, con números cuánticos nnm en la Tabla II.

Como el operador (19) porta la representación E_g , el producto directo que consideraremos es:

$$A_{2u} \otimes E_g = E_u, \tag{20}$$

que corresponde a n y m impar para $3(nnm)$ en la Tabla II. De acuerdo con (57) es de esperarse entonces que

$$\widehat{F}_\alpha^{E_g} |\Psi^{(A_{2u})}\rangle \cong |\Phi_\beta^{(E_u)}\rangle; \quad \alpha = 1, 2. \tag{21}$$

lo cual implica que

$$\langle \Psi_j^{(E_u)} | \widehat{F}_\alpha^{(E_g)} | \Psi^{(A_{2u})} \rangle \neq 0; \quad j = 1, 2. \tag{22}$$

A continuación demostraremos que este es efectivamente el caso.

Ahora bien, la representación matricial de los operadores (19) en la base (12) es diagonal y está dada por:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1^{(E_g)} &= \|\langle \Psi_{n'} | \widehat{F}_1^{(E_g)} | \Psi_n \rangle\| \\ &= \frac{\sqrt{5}(n^2 - m^2)\pi^{\frac{3}{2}}}{2L^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{F}_2^{(E_g)} &= \|\langle \Psi_{n'} | \widehat{F}_2^{(E_g)} | \Psi_n \rangle\| \\ &= \frac{\sqrt{15}(m^2 - n^2)\pi^{\frac{3}{2}}}{2L^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{23}$$

Aquí las componentes de estos operadores han sido etiquetados con números consecutivos, pero en realidad es una forma compacta de etiquetado de acuerdo a la cadena de grupos $\mathcal{O}_h \supset \mathcal{D}_{4h} \supset \mathcal{D}_{2h}$, de tal forma que las componentes de las representaciones porten representaciones irreducibles de los subgrupos respectivos [24]. Así pues tenemos la correspondencia: $1 \rightarrow (A_{1g}, A_g)$; $2 \rightarrow (B_{1g}, A_g)$.

Las matrices (23) se obtienen aplicando directamente los operadores diferenciales (19) sobre la base original (12). Aunque este resultado pudiera parecer de nula relevancia, no es así, debido a que representa el primer paso para establecer la conexión entre los estados en la base adaptada por simetría. Así pues debemos llevar a cabo un cambio de base del subespacio de funciones $\mathcal{L}_3 = \{|\Psi_{nnm}\rangle, |\Psi_{nmn}\rangle, |\Psi_{mnn}\rangle\}$ al correspondiente subespacio adaptado por simetría. La proyección nos provee del siguiente resultado [5,23,24]

$$\begin{aligned} |\Psi^{(A_{2u})}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (\Psi_{nnm} + \Psi_{nmn} + \Psi_{mnn}), \\ |\Psi_1^{(E_u)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{mnn} - \Psi_{nmn}), \\ |\Psi_2^{(E_u)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (\Psi_{nmn} + \Psi_{mnn} - 2\Psi_{nnm}), \end{aligned}$$

y en forma matricial

$$\begin{aligned} (|\Psi^{(A_{2u})}\rangle, |\Psi_1^{(E_u)}\rangle, |\Psi_2^{(E_u)}\rangle) \\ = (|\Psi_{nnm}\rangle, |\Psi_{nmn}\rangle, |\Psi_{mnn}\rangle)\mathbf{S}, \end{aligned} \tag{24}$$

donde \mathbf{S} tiene la forma

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}. \tag{25}$$

Ahora bien, los elementos de matriz en esta nueva base están conectados con los originales (23) a través de la transformación de semejanza [5,23]

$$\|\langle \Psi_\alpha^{(\Gamma')} | \widehat{F}_i^{(E_g)} | \Psi_\beta^{(\Gamma)} \rangle\| = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{F}_i^{(E_g)} \mathbf{S}, \tag{26}$$

y explícitamente

$$\begin{aligned} \|\langle \Psi_\alpha^{(\Gamma')} | \widehat{F}_1^{(E_g)} | \Psi_\beta^{(\Gamma)} \rangle\| &= \sqrt{\frac{5}{8}} \frac{(m^2 - n^2)\pi^{3/2}}{L^2} \\ &\times \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, \\ \|\langle \Psi_\alpha^{(\Gamma')} | \widehat{F}_2^{(E_g)} | \Psi_\beta^{(\Gamma)} \rangle\| &= \sqrt{\frac{5}{8}} \frac{(m^2 - n^2)\pi^{3/2}}{L^2} \\ &\times \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{27}$$

De este resultado se puede apreciar que el estado $|\Psi^{(A_{2u})}\rangle$ está conectado con $|\Psi_\alpha^{(E_u)}\rangle$, ya que sus respectivos elementos de matriz

$$\langle \Psi_1^{(E_u)} | \widehat{F}_2^{(E_g)} | \Psi^{(A_{2u})} \rangle = \sqrt{\frac{5}{8}} \frac{(n^2 - m^2)\pi^{3/2}}{L^2}, \tag{29}$$

$$\langle \Psi_2^{(E_u)} | \widehat{F}_1^{(E_g)} | \Psi^{(A_{2u})} \rangle = \sqrt{\frac{5}{8}} \frac{(m^2 - n^2)\pi^{3/2}}{L^2} \tag{30}$$

son no nulos. Esto es precisamente lo que nos propusimos demostrar para este caso. Este es sin embargo un resultado general que se aplica a todas los estados accidentalmente degenerados, consecuencia de que los operadores (19) portan la representación E_g .

Hemos verificado que los operadores (19) conectan los estados degenerados cuando \mathcal{O}_h es considerado el grupo de simetría. Estos operadores generan además el grupo bidimensional continuo \mathcal{T} cuyos elementos se obtienen mediante exponenciación, en forma similar al procedimiento para obtener el grupo de rotaciones al exponenciar los generadores de momento angular [16,26,27,28]. En nuestro caso los elementos toman la forma

$$\begin{aligned} U(\alpha, \beta) &= U_1(\alpha) \otimes U_2(\beta) \\ &= e^{i\alpha \widehat{F}_1^{(E_g)} + i\beta \widehat{F}_2^{(E_g)}}, \end{aligned} \tag{31}$$

donde

$$U_1(\alpha) = e^{i\alpha\hat{F}_1^{(E_g)}}; \quad U_2(\beta) = e^{i\beta\hat{F}_2^{(E_g)}}. \quad (32)$$

Los parámetros $\{\alpha, \beta\}$ son continuos, aunque restringidos a un intervalo finito, de ahí que el grupo asociado sea compacto [16,24]. El producto directo involucrado en (31) es una consecuencia de que los operadores (19) conmutan entre sí [16]

$$[\hat{F}_1^{(E_g)}, \hat{F}_2^{(E_g)}] = 0. \quad (33)$$

Veamos ahora la transformación de uno de los elementos de \mathcal{T} bajo los elementos $R \in \mathcal{O}_h$. Tomando en cuenta que

$$\hat{\mathcal{O}}_R \hat{F}_i^{(E_g)} \hat{\mathcal{O}}_R^{-1} = \sum_{j=1}^2 D_{ji}^{(E_g)}(R) \hat{F}_j^{(E_g)} \quad (34)$$

se obtiene [24]

$$\hat{\mathcal{O}}_R U(\alpha, \beta) \hat{\mathcal{O}}_R^{-1} = e^{i(\alpha D_{11}^{(E_g)}(R) + \beta D_{12}^{(E_g)}(R)) \hat{F}_1^{(E_g)} + i(\alpha D_{21}^{(E_g)}(R) + \beta D_{22}^{(E_g)}(R)) \hat{F}_2^{(E_g)}} \equiv U(\alpha', \beta'), \quad (35)$$

donde

$$\alpha' = \alpha D_{11}^{(E_g)}(R) + \beta D_{12}^{(E_g)}(R), \quad (36a)$$

$$\beta' = \alpha D_{21}^{(E_g)}(R) + \beta D_{22}^{(E_g)}(R). \quad (36b)$$

El resultado (35) puede ser expresado de la siguiente forma

$$\hat{\mathcal{O}}_R U(\alpha, \beta) = U(\alpha', \beta') \hat{\mathcal{O}}_R, \quad (37)$$

lo cual significa que el subgrupo \mathcal{T} es invariante en el contexto del nuevo grupo \mathcal{G} , el cual puede ser expresado en términos del producto semidirecto [11]

$$\mathcal{G} = \mathcal{T} \wedge \mathcal{O}_h, \quad (38)$$

o bien en términos del desarrollo en clases laterales [24,11]

$$\mathcal{G} = \sum_{\lambda=1}^{|\lambda|} S_\lambda \mathcal{T};$$

$$|\lambda| = \frac{|\mathcal{G}|}{|\mathcal{T}|} = |\mathcal{O}_h|; \quad S_\lambda \in \mathcal{O}_h. \quad (39)$$

Así pues, todos los elementos $g \in \mathcal{G}$ pueden ser reescritos en términos del producto de un elemento de \mathcal{T} y otro de \mathcal{O}_h :

$$g = \hat{\mathcal{O}}_R U(\alpha, \beta); \quad R \in \mathcal{O}_h, \quad g \in \mathcal{G}, \quad (40)$$

con el producto de elementos $gg' = g''$. Así pues llegamos a la conclusión de que el grupo de simetría de una partícula atrapada en una caja cúbica con paredes impenetrables está dado por el producto semidirecto (38).

En el problema de la partícula atrapada en la caja cúbica los operadores $F_i^{(\Gamma)}$ juegan el mismo papel que el vector de Laplace-Runge-Lenz en el átomo de hidrógeno. Por otra parte, el Hamiltoniano es el operador invariante en \mathcal{T} y corresponde al Casimir (operador invariante) de $SO(4)$ [16]. En nuestro caso la estructura del grupo de simetría es muy diferente pues contiene operaciones discretas y continuas, es decir, es un grupo mixto. Sin embargo, la estructura del grupo (38) tiene una cercana analogía con los grupos espaciales que aparecen en los cristales, ya que también en ese caso el

grupo de simetría es un producto semidirecto entre el grupo de traslaciones y el grupo puntual. En nuestro caso las transformaciones discretas tienen su correspondencia con el grupo puntual, mientras que el conjunto de transformaciones continuas es análogo al grupo traslacional [11]. Este hecho es crucial, ya que permite tomar ventaja de esta analogía para construir las representaciones irreducibles del nuevo grupo mediante la técnica de inducción de representaciones [24,11].

En este análisis sólo se consideró el tipo de degeneración geométrica. La conmensurabilidad aparece cuando al menos dos de los lados son diferentes pero uno múltiplo del otro. La degeneración debida a estas situaciones no ha sido analizada con el mismo detalle [32]. Por otra parte tampoco se consideró la degeneración pitagórica. Esto es un caso abierto hasta ahora.

El procedimiento para identificar el grupo de simetría \mathcal{G} partiendo del subgrupo \mathcal{O}_h tiene aspectos generales. Con el propósito de hacer evidente este procedimiento y mostrar el uso de conceptos como la subducción en la consecución de esta meta, presentaremos un ejemplo con un grupo de simetría supuesto \mathcal{D}_2 , en donde la degeneración accidental se hace presente.

3. Un ejemplo abstracto de degeneración accidental

Supongamos que para un sistema libre de campos magnéticos externos descrito por el Hamiltoniano \hat{H} , identificamos al grupo \mathcal{D}_2 como el grupo de simetría del sistema, es decir

$$[\hat{H}, \mathcal{O}_R] = 0; \quad \forall R \in \mathcal{D}_2. \quad (41)$$

Un posible espectro asociado al sistema se muestra en la Fig. 3. Como puede apreciarse varios estados con diferente irrep están degenerados. Por ejemplo, los estados $|B_1\rangle, |B_2\rangle, |B_3\rangle$ presentan la misma energía y como tienen asociadas irreps diferentes, la degeneración es accidental. De igual forma aparecen estados totalmente simétricos con la misma energía. Esto se presenta repetidas veces, de ahí que identifiquemos la degeneración como sistemática. Por lo tanto se espera que exista un grupo mayor cuyos elementos mez-

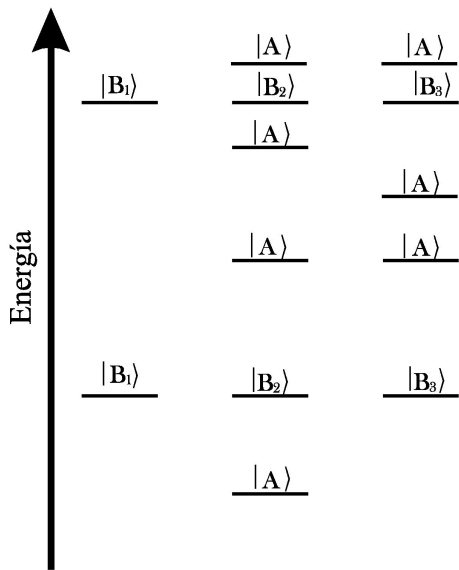


FIGURA 3. Niveles de energía de un sistema con supuesto grupo de simetría D_2 .

clen las funciones degeneradas. Al igual que en el ejemplo de la caja cúbica, necesitamos identificar operadores análogos a \hat{F}_i que sean responsables de tal mezcla. Supongamos que en nuestro caso abstracto el grupo de simetría también es un grupo puntual; buscamos entonces un grupo cuyas representaciones al ser subducidas al grupo D_2 reproduzcan el espectro con las etiquetas correspondientes. Pero antes de proceder al análisis recordaremos el concepto de subducción con el propósito de clarificar tal aseveración. Sea H un subgrupo de G , y $D^{(\mu)}(G)$ una representación de G . La subducción $D^{(\mu)}(G) \downarrow H$ se define como

$$D^{(\mu)}(G) \downarrow H = \{D^{(\mu)}(h) | h \in H\}, \quad (42)$$

es decir, se seleccionan de entre todas las matrices de representación de G , sólo aquellas del subgrupo H . La representación resultante de H es en general reducible.

Consideremos ahora la subducción $D^{(\mu)}(T) \downarrow D_2$ que se muestra en la Tabla III. La columna de la derecha, que es la frecuencia $f(\gamma; \mu)$ con que la representación γ del subgrupo D_2 aparece en la representación μ de T , se obtiene mediante la conocida fórmula [5,23]

$$f(\gamma; \mu) = \frac{1}{|D_2|} \sum_{h \in D_2} \chi^{(\gamma)*}(h) \chi^{(\mu)}(h). \quad (43)$$

El resultado nos dice que desde la perspectiva del grupo T las representación bidimensional subduce a dos veces la representación A , mientras que la irrep F subduce a $B_1 \oplus B_2 \oplus B_3$. Así pues, desde el punto de vista del subgrupo D_2 la representación F se ve como tres estados degenerados con etiquetas B_1, B_2, B_3 , mientras que los estados E se ven como pares de estados degenerados tipo A . El espectro de la Fig. 3 sugiere que el verdadero grupo de simetría es el tetraédrico T ya que se satisface lo antes expuesto.

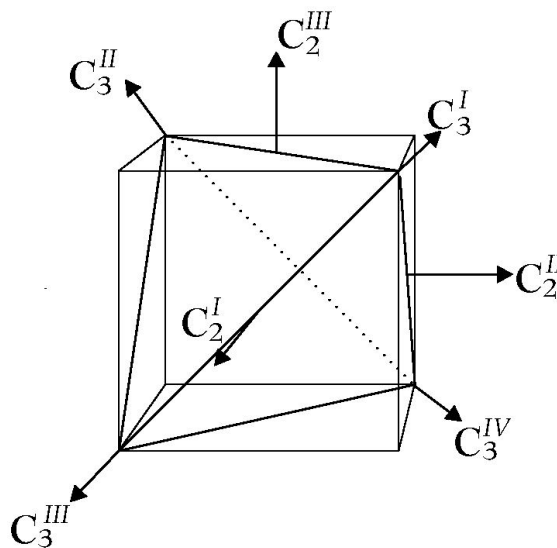


FIGURA 4. Elementos de simetría del grupo T .

TABLA III. Subducción de las representaciones del grupo T al grupo D_2 .

$D^{(\mu)}(T)$	$D^{(\mu)}(T) \downarrow D_2$
A	A
E_1	A
E_2	A
F	$B_1 \oplus B_2 \oplus B_3$

Si siguiendo las mismas ideas de la sección anterior proponemos el operador \hat{C}_3^I de la Fig. 3 como aquel que mezcla las funciones degeneradas. Esto está basado en el hecho de que el operador \hat{C}_3^I mezcla las tres componentes cartesianas, y de que es un elemento representativo del desarrollo en clases laterales [22]

$$T = D_2 + C_3^I D_2 + (C_3^I)^2 D_2. \quad (44)$$

Ahora bien, a partir del concepto de elementos conjugados [5], obtenemos, sin necesidad de recurrir a la tabla de multiplicación [22], la representación generada para las rotaciones C_2^I y C_2^{III} en la base de las cuatro operadores de rotación \hat{C}_3 equivalentes, cuyos elementos de simetría se indican en la Fig. 4:

$$\begin{aligned} & \hat{O}_{C_2^I}(\hat{C}_3^I, \hat{C}_3^{II}, \hat{C}_3^{III}, \hat{C}_3^{IV}) \hat{O}_{C_2^I}^{-1} \\ &= (\hat{C}_3^I, \hat{C}_3^{II}, \hat{C}_3^{III}, \hat{C}_3^{IV}) \Delta(C_2^I), \end{aligned} \quad (45)$$

$$\begin{aligned} & \hat{O}_{C_2^{III}}(\hat{C}_3^I, \hat{C}_3^{II}, \hat{C}_3^{III}, \hat{C}_3^{IV}) \hat{O}_{C_2^{III}}^{-1} \\ &= (\hat{C}_3^I, \hat{C}_3^{II}, \hat{C}_3^{III}, \hat{C}_3^{IV}) \Delta(C_2^{III}), \end{aligned} \quad (46)$$

donde

$$\Delta(C_2^{III}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\Delta(C_2^I) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Estamos interesados en la representación de estos elementos porque ambos se necesitan para distinguir las representaciones irreducibles del grupo \mathcal{D}_2 [11,29].

La representación (47) es reducible. Su reducción a representaciones irreducibles se puede obtener en forma inmediata al diagonalizar la matriz \mathbf{M} definida por : [9,29,30,31]

$$\mathbf{M} = \Delta(C_2^{III}) + 3\Delta(C_2^I), \quad (48)$$

lo cual provee los siguientes operadores

$$\hat{P}^A = \hat{C}_3^I + \hat{C}_3^{II} + \hat{C}_3^{III} + \hat{C}_3^{IV}, \quad (49)$$

$$\hat{P}^{B_1} = \hat{C}_3^I + \hat{C}_3^{II} - \hat{C}_3^{III} - \hat{C}_3^{IV}, \quad (50)$$

$$\hat{P}^{B_2} = \hat{C}_3^I - \hat{C}_3^{II} - \hat{C}_3^{III} + \hat{C}_3^{IV}, \quad (51)$$

$$\hat{P}^{B_3} = \hat{C}_3^I - \hat{C}_3^{II} + \hat{C}_3^{III} - \hat{C}_3^{IV}. \quad (52)$$

La expresiones (49-52) pueden obtenerse por el método de proyección tradicional basado en la aplicación del operador [5,23]

$$\hat{P}^{(\Gamma)} = \sum_{R \in \mathcal{D}_2} \chi^{(\Gamma)*}(R) \hat{O}_R, \quad (53)$$

donde $\chi^{(\Gamma)}(R)$ corresponde al caracter de la Γ -ésima representación irreducible [5]. Puesto que aquí tenemos que proyectar un operador, tendríamos

$$\hat{P}^{(\Gamma)} \hat{C}_3^I = \sum_{R \in \mathcal{D}_2} \chi^{(\Gamma)*}(R) \hat{O}_R \hat{C}_3^I \hat{O}_R^{-1}. \quad (54)$$

Al proyectar sobre las diferentes irreps de \mathcal{D}_2 se obtienen las mismas expresiones (49-52) que se obtuvieron por el método de vectores propios [29-31,9].

La proyección (49-52) nos indica de qué forma los operadores \hat{C}_3^I conectan los estados propios del espectro de la Fig. 3. Vemos que al aparecer las componentes $A \oplus B_1 \oplus B_2 \oplus B_3$ en los proyectores, se pueden conectar todos los estados degenerados. Por ejemplo, los estados $|B_1\rangle$ y $|B_2\rangle$ se conectan con el operador \hat{P}^{B_3} , los estados $|B_2\rangle$ y $|B_3\rangle$ con el operador \hat{P}^{B_1} , los estados $|B_1\rangle$ y $|B_3\rangle$ con el operador \hat{P}^{B_2} , mientras que los estados $|A\rangle$ se conectan con el operador \hat{P}^A . Esto se puede apreciar desde el siguiente punto de vista. El operador \hat{C}_3^I se ha descompuesto en los proyectores (49-52):

$$\hat{C}_3^I = \frac{1}{4} \left(\hat{P}^A + \hat{P}^{B_1} + \hat{P}^{B_2} + \hat{P}^{B_3} \right), \quad (55)$$

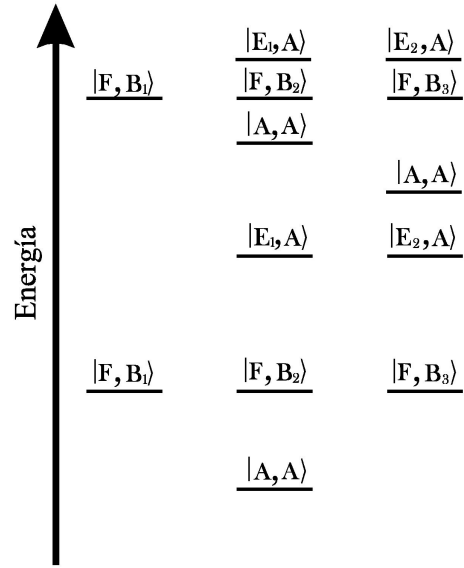


FIGURA 5. Niveles de energía etiquetados de acuerdo a la cadena $\mathcal{T} \supset \mathcal{D}_2$.

de tal forma que su acción conlleva a la conexión de estados antes discutida: mezcla todos los estados con degeneración accidental. Esto demuestra que el grupo \mathcal{T} es efectivamente el verdadero grupo de simetría. Los estados degenerados se mezclan bajo la acción de los elementos del grupo \mathcal{T} con excepción de aquellos que se encuentran en el subgrupo \mathcal{D}_2 .

En este sistema el etiquetado apropiado de estados se efectúa con las representaciones irreducibles de \mathcal{T} cuyas dimensiones de sus representaciones irreducibles son compatibles con la degeneración del espectro. Esto se ilustra en la Fig. 5. Notemos que la etiqueta del subgrupo se mantiene. Esto es conveniente no sólo para distinguir componentes de las irreps del grupo, sino que puede ser útil en situaciones de rompimiento de simetría [6].

4. Reglas de selección

Cuando un sistema interacciona con radiación se inducen transiciones entre diferentes estados estacionarios [33]. Dar cuenta de cuándo una transición está permitida o prohibida se conoce como reglas de selección. Conocer estas reglas es fundamental para la interpretación de los espectros.

El análisis del proceso de interacción del sistema con la radiación permite identificar el efecto de las transiciones con diferente grado de aproximación, acorde con un desarrollo multipolar [34]. Las contribuciones más importantes son la dipolar eléctrica, dipolar magnética y cuadrupolar eléctrica, en ese orden de importancia. Cada una de estas contribuciones tiene reglas de selección específicas, las cuales se reflejan en el cálculo de elementos de matriz del tipo (15):

$$I_{q'\Gamma'\gamma';q\Gamma\gamma} = \langle q'\Phi_{\gamma'}^{(\Gamma')} | \hat{F}_i^{(\rho)} | q\Psi_{\gamma}^{(\Gamma)} \rangle, \quad (56)$$

donde el operador $\hat{F}_i^{(\rho)}$ corresponde al operador dipolar eléctrico, magnético ó cuadrupolar eléctrico.

La pregunta que surge de inmediato acorde con la discusión de las secciones precedentes, es la concerniente a las consecuencias de no identificar correctamente el grupo de simetría al efectuar el análisis de las reglas de selección. Esta pregunta es una consecuencia inmediata de que los números cuánticos involucrados en las transiciones provienen de la simetría del sistema. Para ver cómo es que esto sucede consideraremos un ejemplo simple.

Supongamos un sistema con grupo de simetría C_{3v} . Entonces los niveles estarán etiquetados con la energía y números cuánticos asociados a las irreps del grupo, que son A_1, A_2, E . El dipolo eléctrico por otra parte es base de las irreps $A_1 \oplus E$, lo que implica que la transición $A_1 \rightarrow A_2$ está prohibida, ya que $A_2 \notin A_1 \otimes A_1 = A_1$ y $A_2 \notin A_1 \otimes E = E$. La pregunta que nos atañe en esta sección es si al considerar un subgrupo, como es el caso cuando la degeneración accidental sistemática aparece, la misma regla de selección prevalece. Para responder a esta pregunta consideremos el subgrupo $C_s = \{E, \sigma\}$. Si se hubiera identificado a este subgrupo como el grupo de simetría, los niveles estarían etiquetados con la energía y las irreps A y B . El dipolo por otra parte porta las irreps $A \oplus 2B$. Pero esto implica que todas las transiciones estarían permitidas en la aproximación dipolar, ya que el dipolo conecta cualesquier par de estados. Este resultado contrasta con el análisis anterior al considerar el grupo de simetría C_{3v} . Esto significa que es posible que al considerar un subgrupo como grupo de simetría lleguemos a conclusiones erróneas en cuanto a las transiciones permitidas, siendo la identificación del grupo de simetría esencial en la descripción de un sistema.

5. Conclusiones

En esta trabajo se ha presentado un procedimiento para identificar el grupo de simetría cuando aparece una degeneración accidental sistemática. Para ello se consideró el espectro de una partícula atrapada en una caja cúbica con paredes infinitas. Este problema, a pesar de tener una fácil solución que aparece en la mayoría de los libros de texto de mecánica cuántica, involucra un análisis de simetría que está muy lejos de ser trivial, por lo que apenas se menciona como un problema interesante de degeneración [21]. La presentación está concentrada en la identificación del grupo de simetría, sin incluir la construcción de las representaciones irreducibles, lo cual se puede encontrar en la Ref. 24. Adicionalmente al problema de la caja cúbica, se presentó un problema abstracto con el propósito de ilustrar el análisis de representaciones que hay detrás de la identificación del grupo de simetría. Por último, también se mostraron las consecuencias de identificar incorrectamente el grupo de simetría desde el punto de vista de las reglas de selección, problema fundamental en cualquier análisis espectroscópico. El análisis expuesto no ha tomado en cuenta la degeneración pitagórica que se mencionó. Este es un problema abierto que posiblemente sea resuelto fuera del ámbito del teorema de Wigner.

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por DGAPA-UNAM bajo el proyecto No. IN109113.

1. F.I. Stancu, *Group Theory in Subnuclear Physics*, Academic Press, (New York 1959).
2. E.P. Wigner, *Group Theory and its Applications to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*, Academic Press, (New York 1959).
3. W.M. Gibson and B.R. Pollard, *Symmetry Principles in Elementary Particle Physics* Cambridge Monographs of Physics, Cambridge University Press. (Cambridge, 1976).
4. E.P. Wigner, *Symmetries and Reflections* OX BOW PRESS. Woodbridge, (Connecticut, 1979).
5. M. Hamermesh, *Group Theory and its Application to Physical Problems*. Dover Publications, (Inc. New York. 1962).
6. M. Tinkham, *Group theory and Quantum Mechanics*. Dover Publications, (Inc. New York. 1992).
7. F. Iachello, *Beauty in Nature: Symmetry* **1488** (2012) 402-4012.
8. P.R. Bunker and P. Jensen, *Molecular Symmetry and Spectroscopy*. NRC Research Press, (Ottawa. 1988).
9. R. Lemus, *Symmetry* **4** (2012) 667.
10. H.V. McIntosh, *Symmetry and Degeneracy in Group Theory and Its Applications*. Edited by E.M. Loebel. Academic Press, (New York. 1971). Vol I. 75-144.
11. S.L. Altmann, *Induced Representations in Crystals and Molecules. Point, Space and Nonrigid Molecule Groups*. (Academic Press, 1977).
12. V. Heine, *Group Theory in Quantum Mechanics*. over Publications, INC. New York, 1993.
13. A. Jellal, M. Daoud y Y. Hassouni, *Phys.Lett.B.* **474** (2000) 122-129.
14. A. Pallares-Rivera, F. de J. Rosales-Aldape y M. Kirchbach, *J. Phys.A: Math. Theor.* **47** (2014) 085303.
15. G. Lévai, F. Cannata y A. Ventura, *J. Phys.A: Math. Theor.* **35** (2002) 5041-5057.
16. B.G. Wybourne, *Classical Groups for Physicists*. Wiley, (New York. 1974).
17. H. Goldstein, *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, (New York. 1980).
18. V. Bargmann, *Z.Physik* **99** (1936) 576-582.
19. V. Fock, *Z.Physik* **98** (1935) 145-154.
20. F. Leyvraz, A. Frank, R. Lemus and M.V. Andrés, *Am. J. Phys.* **65** (1997) 1087-1094.

21. D.C. Harris y M.D. Bertolucci, *Symmetry and Spectroscopy. An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*. Dover Publications, INC., (New York. 1978).
22. S.L. Altmann and P. Herzog, *Point-Group Theory Tables*. Clarendon Press, (Oxford. 1994).
23. D.M. Bishop, *Group Theory and Chemistry*. Dover Publications, INC., (New York. 1973).
24. A.O. Hernández-Castillo and R. Lemus, *J. Phys. A: Math, Theor.* **46** (2013) 465201.
25. G.B. Shaw, *J. Phys. A.* **7** (1974) 1537-1546.
26. M.E. Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*. (Dover Publications, INC., New York. 1957).
27. D.M. Brink y G.R. Satchler, *Angular Momentum*. (Oxford Science Publications, New York. 1993).
28. A.R. Edmons, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. (Princeton University Press, New Jersey. 1960).
29. J.Q. Chen, *Group Representation Theory for Physicists*. (World Scientific, Singapore, 1989).
30. R. Lemus, *Mol. Phys.*, **101** (2003) 2511.
31. O. Álvarez-Bajo, R. Lemus, M. Carvajal and F. Pérez-Bernal, *Mol. Phys.* **109** (2011) 797.
32. R. Lemus, A. Frank, M.V. Andrés y F. Leyvraz, *Am. J. Phys.* **66** (1988) 629.
33. L.D. Landau y E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory* (Pergamon Press, New York. 1977).
34. L.I. Schiff, *Quantum Mechanics*. (McGraw-Hill, New York. 1968).