SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHROEDINGER

TESIS QUE PRESENTA

MARCO ANTONIO NUÑEZ PERALTA

PARA LA OBTENCIÓN DEL GRADO DE

MAESTRO EN MATEMÁTICAS

JULIO DE 1992

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA

DIVISION DE CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA

DEDICO ESTE TRABAJO A

MI MADRE

MA. TRINIDAD NUÑEZ P.

Y HERMANO

JORGE NUÑEZ P.

AGRADECIMIENTOS

Deseo hacer patente mi agradecimiento a :

El Dr. Ernesto Lacomba y su grupo por el apoyo prestado para la aceptación del proyecto de tesis.

Al Dr. Antoni Wawrzynczyk por las sugerencias y revisión de resultados originales del trabajo, asi como al Dr. Eduardo Piña por sus valiosos comentarios.

A la Dra. Annik Vivier quien me introdujo en el campo de cálculos atómicos y al Dr. Felipe Zaldivar por su orientación y consejos.

Finalmente al Dr. Gustavo Izquierdo cuyo apoyo fue imprescindible para la realización de este trabajo.

INDICE

INTRODUCCIÓN

La ecuación de Schrödinger se reduce para estados estacionarios al problema de autovalores

(0.1) $$\mathbb{H}u = (-\Delta + V(\bar{r}))u = Eu$$

y existe una reciprocidad entre las funciones de onda $u(r)$ y las extremales del funcional

$$E(u) = \int u^* \mathbb{H} u \ dx \qquad \text{(principio variacional)}$$

sujeto a la restricción

$$\int |u|^2 dx = 1 .$$

La formulación variacional permite aplicar el método de Ritz para hallar los niveles de energía E_n y consiste en lo siguiente :

dada una base ortonormal $\{\phi_K\}$ proponemos la función

$$u^{(N)} = \sum_{K=1}^{N} c_K^{(N)} \phi_K$$

y se minimiza el funcional $E(u)$ respecto a los coeficientes $c_K^{(N)}$,lo que conduce a la ecuación matricial FINITA

(0.2) $$\sum_{\ell=1}^{N} \{<\phi_\ell, \mathbb{H}\phi_K> - E^{(N)}\delta_{K\ell}\} \ c_\ell^{(N)} = 0 \qquad 1 \le k \le N .$$

La gran mayoria de los textos de mecánica cuántica, por ejemplo [2] y [3], asumen por obvios los siguientes resultados :

(0.3) cuando N-->∞ el espectro del problema (0.2) se aproxima al del operador $\mathbb{H}$

(0.4) los vectores propios de (0.2) "convergen" a los de $\mathbb{H}$

(0.5) cuanto menor es el autovalor mínimo de (0.2) más precisa en la función propia correspondiente.

Es importante notar que hasta la fecha no existe una demostración rigurosa de las afirmaciones (0.4) y (0.5), en base a las cuales se han realizado la mayoria de los cálculos atómicos y moleculares de las últimas tres décadas.

Las propiedades del sistema en estudio se determinan através de valores esperados de operadores, entre las cuales tenemos los momentos de la densidad de carga :

$$<r^n> = \int d\bar{r}_2 \dots d\bar{r}_m \ |u|^2 \ |\bar{r}_1|^n .$$

La tabla I muestra dos de los calculos más "precisos" (basados en el método de Ritz) para algunos momentos $<r^K>$ del átomo de Litio.

Tabla I. Momentos de la densidad del átomo de Litio

$\langle r^{-2} \rangle$	30.242 5 [a]	30.240 7 [b]
$\langle r^{-1} \rangle$	5.717 929	5.718 08
$\langle r^{4} \rangle$	550.040 2	550.416 3
$\langle r^{9} \rangle$	20.00×10^{6}	25.83×10^{6}
$\langle r^{10} \rangle$	21.036×10^{7}	40.747×10^{7}

[a]Ref. [19] y [b]Ref. [20].

Las diferencias para momentos pequeños son aceptables pero para los dos últimos son desproporcionadas. Ejemplos como el anterior pueden hallarse en la literatura más reciente, y a pesar de la evidencia numérica de la NO CONVERGENCIA el método de Ritz, este sigue siendo uno de los pilares de los cálculos atómicos y moleculares "precisos". Hay numerosos argumentos para justificar las discrepacias entre los calculos sobre un mismo sistema, pero hasta ahora nadie ha dado una prueba formal de sus arguementos, en la gran mayoria de los trabajos se ha eludido o se plantea de forma muy vaga el problema fundamental de la convergencia a las funciones propias en un sentido que garantice el cálculo preciso de valores esperados.

El primer problema que tenemos es :

1ª ¿ Cuál es el concepto de convergencia a las funciones propias del operador $\mathbb{H}$ que garantiza la convergencia a los valores esperados del operador $\mathbb{H}$?

para responder a esta pregunta recordemos que la condición de normalización

$$\int |u|^2 dx = 1 < \infty$$

equivale a pedir que la función de onda $u(r)$ pertenezca al espacio de Hilbert $L_2(R^m)$ cuya definición y propiedades básicas introducimos en el capítulo I. Una de las cualidades del espacio $L2(R^m)$ es que es un espacio métrico, lo que permite dar un significado preciso el concepto de proximidad entre funciones y por tanto al de convergencia :

la sucesión $\{\Psi_n\}$ en $L_2(R^m)$ converge a $\Psi \in L_2(R^m)$ si satisface

$$\lim \|\Psi_n - \Psi\| = \lim \int |\Psi_n - \Psi|^2 dx = 0$$

y precisamente este concepto de convergencia garantiza la convergencia a los valores esperados de un operador simétrico T

$$\lim_m \lim_n \langle \Psi_n | T | \Psi_m \rangle = \langle \Psi | T \Psi \rangle$$

lo cual es inmediato de la desigualdad de Schwartz. Por tanto el contexto matemático para estudiar la ecuación de Schrödinger y su solución numérica es el de espacios de Hilbert.

El segundo problema que tenemos es :

2ª ¿ Qué propiedades debe tener el operador $\mathbb{H}$ para que el método de Ritz converja a sus funciones propias en la norma de $L_2(R^m)$?

La respuesta a esta pregunta no es trivial y requiere de un concepto preciso de operador, el cual introducimos en el capítulo II. En este capítulo hacemos énfasis en que las propiedades de un operador dependen del espacio en que actue. Los operadores acotados son el objeto principal de estudio, y entre estos destacan los operadores COMPACTOS para los cuales tenemos una respuesta afirmativa a la convergencia del método de Ritz:

Si un operador $S:L_2(R^m) \dashrightarrow L_2(R^m)$ es compacto y autoadjunto entonces el método de Ritz converge al espectro y funciones propias de S ;

(la prueba de la última afirmación se da en IV.5) lo anterior permite enteder por que no coinciden los cálculos basados en el método de Ritz. Para que un operador sea compacto es necesario que carezca de espectro continuo, pero es bien conocido el hecho de que el operador de Schröedinger (con interación coulombiana) tiene un espectro continuo y por tanto su resolvente $(\mathbb{H}-z)^{-1}$ (que es un operador acotado) también lo tiene , lo que no garantiza la convegencia del método de Ritz, y la evidencia numérica muestra que no hay convergencia ya que NO coinciden las cifras de valores esperados distintos de la energía.

Asi llegamos al problema fundamental que resolvemos en el presente trabajo :

Desarrollar un método que garantice la convergencia a las funciones propias del operador $\mathbb{H}$ cuando éste carece de resolvente compacta .

En el capítulo III exponemos los aspectos más relevantes de la teoría de operadores no acotados que usaremos en el trabajo y apartir del capítulo IV comenzamos a desarrollar el método.

En el capítulo IV mostramos que para una gran variedad de potenciales V(x) (incluida la interacción coulombiana entre N-partículas) el problema de Dirichlet

$$\{-\Delta + V\}\Psi = E\Psi \quad , \quad \Psi(\partial\Omega) = 0$$

(donde Ω es una región acotada de R^m y $\partial\Omega$ su frontera) puede resolverse con toda la precisión deseada (que permita una computadora) por el método de Ritz, lo cual se basa en que el operador de Schrödinger en $L2(\Omega)$ tiene resolvente compacta.

Intuitivamente, si las dimensiones de Ω son mucho mayores que las dimensiones físicas del sistema en estudio (por ejemplo un átomo en el centro de un balon de futbol) entonces los estados estacionarios del problema de Dirichlet deben ser muy parecidos a los del sistema no confinado, y es precisamente este argumento los que nos lleva a planterar el método propuesto :

Las funciones propias del problema de Dirichlet se aproximan a las del sistema no restringido cuando la region Ω se expande por todo el espacio R^m.

La prueba de la afirmación anterior la damos en el capítulo V através dèl importante concepto de estabilidad del espectro puntual introducido por Kato [6]. Por tanto basta con resolver el problema de Dirichlet en una región suficientemente grande para calcular con la presición deseada las funciones propias del operador de Schrödinger.

En el capítulo VI aplicamos el método a operadores en una dimensión y en el capítulo VII mostramos que también puede aplicarse para calcular la función de estado base de átomos y moléculas.

I FORMAS SESQUILINEALES Y ESPACIOS DE HILBERT

$1. Formas sesquilineales

1. Conceptos. Desigualdad de Schwartz

En esta sección asumimos que H es un espacio vectorial y los escalares son números complejos.

Def. Una forma sesquilineal (abreviando f.s.l.) sobre un espacio vectorial H es una función h:HxH-->ℂ que satisface

$$h(\alpha f+\beta g, q) = \alpha^* h(f,q) + \beta^* h(g,q),$$
$$h(f, \alpha g+\beta q) = \alpha\, h(f,g) + \beta\, h(f,q)\ ;\ \alpha,\beta \in \mathbb{C}.$$

Cada f.s.l. induce una forma cuadrática .

Def. La forma cuadrática inducida E:H-->ℂ inducida por la forma h(.,.) es

$$E(f) = h(f,f)\ ,\ \text{para } f \in H.$$

Dada una forma cuadrática E(.) puede hallarse la forma h(.,.) que la induce como establece el

Teorema (Identidad de Polarización). Sea h(.,.) una forma sobre en espacio vectorial H y E(.) la forma cuadrática respectiva, entonces

$$h(f,g) = \frac{1}{4}\{E(f+g) - E(f-g) + i\,E(f-ig) - i\,E(f+ig)\}.$$

La clase más importante de formas sesquilineales que estudiaremos son las simétricas o hermitianas.

Def. Una f.s.l. h(.,.) se llama simétrica cuando satisface

$$h(f,g) = h(g,f)^*,$$

de lo cual se deduce que la forma cuadrática respectiva E(.) es real valuada

$$E(f) = h(f,f) = h(f,f)^* = E(f)^*.$$

Def. Una f.s.l. h(.,.) simétrica se llama positiva (no negativa) si cumple

$$h(f,f) > 0 \text{ para } f \neq 0\ (h(f,f) \geq 0 \text{ para cada } f \in H).$$

La desigualdad siguiente es una de las propiedades más importantes que tienen las f.s.l. positivas.

Teorema (Desigualdad de Schwartz). Si la f.s.l. h(.,.) es positiva entonces

$$|h(f,g)| \leq \{E(f)\cdot E(g)\}^{1/2}.$$

2. Producto escalar,norma y pre-espacio de Hilbert

Cada f.s.l. positiva definida en un espacio vectorial H da lugar a lo que se conoce como producto interior lo que permite definir la estructura de espacio de Hilbert (H,<.,.>),una de las más ricas e importantes en aplicaciones tanto físicas como matemáticas.

Def. Cada f.s.l. simtrica y positiva $h(.,.)$ en un espacio vectorial H se denomina producto interior (o escalar), se denota por $\langle .,. \rangle_h$ y tiene las propiedades siguientes

i) $\langle f, \alpha g+h \rangle = \alpha \langle f,g \rangle + \langle f,h \rangle$,
ii) $\langle \alpha f+g,h \rangle = \alpha^* \langle f,h \rangle + \langle g,h \rangle$,
iii) $\langle f,g \rangle = \langle g,f \rangle^*$,
iv) $\langle f,f \rangle = 0$ si y sólo si $f=0$;

la desigualdad de Schwartz toma la forma
$$|\langle f|g \rangle_h| \le \langle f|f \rangle^{1/2} \langle g|g \rangle^{1/2}.$$

Cada producto interior $\langle .,. \rangle$ induce una norma en H, recordemos que una norma es una funcion $\|\cdot\|: H \to R$ real valuada sobre un espacio vectorial H que satisface

i) $\|f\| \ge 0$
ii) $\|f\|=0$ si y sólo si $f=0$
iii) $\|\alpha f\| = |\alpha| \cdot \|f\|$
iv) $\|f+g\| < \|f\| + \|g\|$.

Teorema. Cada producto interior $\langle .,. \rangle_h$ induce una norma dada por
$$\|f\|_h = \langle f|f \rangle_h^{1/2}$$
y por tanto la desigualdad de Schwarz tiene la forma
$$|\langle f,g \rangle_h| \le \|f\|_h \cdot \|g\|_h .$$

Cada norma induce una métrica o distancia $d(.,.)$ entre dos elementos arbitrarios del espacio vectorial H con las propiedades siguientes

i) $d(x,y)=0$ si y sólo si $x=y$,
ii) $d(x,y)=d(y,x)$ (simetría) ,
iii) $d(x,y) \le d(x,z)+d(y,z)$ (desigualdad triangular);
$d(.,.)$ está dada por
$$d(x,y) = \|x-y\| .$$

Ya que cada producto escalar $\langle .,. \rangle$ induce tanto una norma como una métrica en el espacio vectorial H el par $(H., \langle .,. \rangle)$ es un espacio normado y métrico a la vez, pero hay una estructura más: la de pre-espacio de Hilbert.

Def. Un espacio vectorial provisto de un producto interior $\langle .,. \rangle$ es denominado pre-espacio de Hilbert y se denota por $(H, \langle .,. \rangle)$.

Nota. En un mismo espacio vectorial H podemos definir distintos productos interiores $\langle .,. \rangle_h$ y por tanto obtendremos distintos pre-espacios de Hilbert $(H, \langle .,. \rangle_h)$, como veremos en los ejemplos que involucran al espacio vectorial $C_0^\infty(\Omega)$.

Ejemplo. El espacio de Hilbert más elemental es el euclideano R^m , cuyos elementos se definen como
$$x = (x_1, \ldots, x_m)$$
y la suma y multiplicación por escalares por
$$\alpha x + \beta y = (\alpha x_1 + \beta y_1, \ldots, \alpha x_m + \beta y_m) ,$$
el producto interior es $\langle x,y \rangle = \sum_{j=1}^m x_j^* y_j$.

Ejemplo. ℓ_2 se define como el conjunto de sucesiones $\{f_K\}$ que cumplen

$$\sum_{K=1}^{\infty} |f_K|^2 < \infty \ ;$$

la suma y producto por escalares es análoga a la de R^m, y la prueba de que es un espacio vectorial la da precisamente el producto interior

$$\langle (f_K) | (g_K) \rangle = \sum_{K=1}^{\infty} f_K^* \, g_K \ ,$$

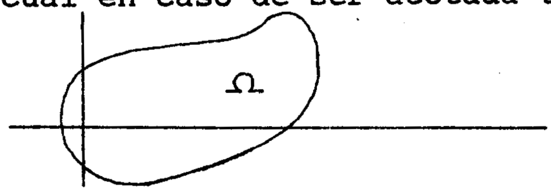
ya que usando la desigualdad de Schwartz en R^m tenemos

$$\sum_{K=1}^{m} |f_K + g_K|^2 \leq 2\left\{ \sum_{K=1}^{m} |f_K|^2 + \sum_{K=1}^{m} |g_K|^2 \right\} \leq 2\left\{ \sum_{K=1}^{\infty} |f_K|^2 + \sum_{K=1}^{\infty} |g_K|^2 \right\},$$

por tanto $$\sum_{K=1}^{\infty} |f_K + g_K|^2 < \infty .$$

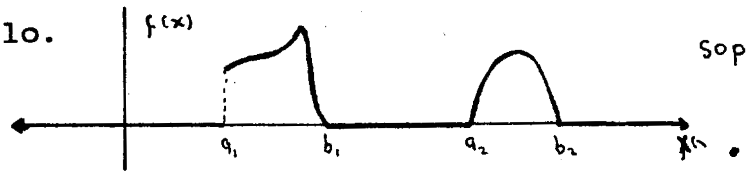
El conjunto $C_0^\infty(\Omega)$. Para introducir algunos de los espacios de Hilbert más importantes en análisis definiremos al espacio vectorial $C_0^\infty(\Omega)$.

Asumiremos que $\Omega \subseteq R^m$ es una región abierta y conexa (puede ser todo R^m), la cual en caso de ser acotada tiene una frontera suave.



Def. El soporte de una funcion $f:\Omega \dashrightarrow \mathbb{C}$ definida sobre Ω es la cerradura del conjunto de puntos en los que no se anula $f(x)$.

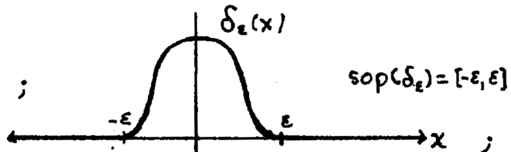
Ejemplo.



$\mathrm{Sop}(f) = [a_1, b_1] \cup [a_2, b_2]$.

Ejemplo.

$$\delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} e^{-\frac{1}{x^2-\varepsilon^2}} & , |x| \leq \varepsilon \\ 0 & |x| \geq 0 \end{cases} \quad ; \text{ donde } \varepsilon > 0 \ ;$$



$\mathrm{sop}(\delta_\varepsilon) = [-\varepsilon, \varepsilon]$;

la misma función anterior pero ahora definida en R^m

$$\delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} e^{-\frac{1}{|x|^2-\varepsilon}} & |x| < \varepsilon \\ 0 & |x| \geq \varepsilon \end{cases} \quad ; \ \mathrm{sop}(\delta_\varepsilon) = \overline{B}_\varepsilon$$

= bola cerrada con centro en el origen y radio $= \varepsilon$.

Cuando el soporte de una función es un conjunto acotado se dice que dicha función es de soporte compacto, como los ejemplos anteriores.

Def. Al conjunto de funciones cuyo soporte es compacto, esta contenido en Ω e infinitamente diferenciables se le denota por $C_0^\infty(\Omega)$.

El ejemplo clásico de elemento de $C_0^\infty(\Omega)$ es la función $\delta_\varepsilon(x)$, y cualquier función de la forma

$$\delta_\varepsilon(x)\, g(x)$$

donde $g(x)$ es infintamente diferenciable, pertenece a $C_0^\infty(\Omega)$.

Nota. $C_0^\infty(\Omega)$ es un espacio vectorial; es decir, si $f(x)$ y $g(x)$ pertenecen a $C_0^\infty(\Omega)$ entonces $af(x)+bg(x)$ también pertenece a $C_0^\infty(\Omega)$ para cualesquiera a,b complejos.

Nota. Otra característica importante del espacio $C_0^\infty(\Omega)$ es la de estar formado por los suficientes elementos de manera que podemos aproximarnos a funciones fuera del conjunto $C_0^\infty(\Omega)$ en distintos sentidos (métricas), esto involucra el concepto de densidad de $C_0^\infty(\Omega)$ en diferentes espacios de funciones que estudiaremos más adelante.

Ahora introduciremos distintos productos escalares en $C_0^\infty(\Omega)$ que definiran distintos pre-espacios de Hilbert.

El espacio $L2_0(\Omega)$. En $C_0^\infty(\Omega)$ definimos el producto interior

$$\langle f | g \rangle = \int_\Omega f(x)^* g(x)\, dx \ ;$$

al pre-espacio de Hilbert $(C_0^\infty(\ \ ),\langle .,.\rangle)$ lo denotamos por $(L2_0(\Omega),\langle .,.\rangle)$, la prueba de que $\langle .,.\rangle$ es un producto interior es sencilla y la norma respectiva la denotamos por $\|\cdot\|$.

El espacio $\overset{\circ}{W}_{1,0}(\Omega)$. Sobre $C_0^\infty(\Omega)$ definimos el producto interior

$$\langle f | g \rangle_1 = \int_\Omega \left\{ f^* g + \sum_{k=1}^m \frac{\partial f^*}{\partial x_k} \frac{\partial g}{\partial x_k} \right\} dx = \langle f | g \rangle + \langle \nabla f | \nabla g \rangle \ ;$$

lo que da el pre-espacio de Hilbert $(\overset{\circ}{W}_{1,0}(\Omega),\langle .,.\rangle_1)$ y la norma respectiva la denotamos por $\|\cdot\|_1$.

Los espacios $\overset{\circ}{W}_{k,0}(\Omega)$. Para generalizar la definición del producto interior $\langle .,.\rangle_1$ introducimos la siguiente notación.

Definimos el multi-índice $\alpha=(\alpha_1,..,\alpha_m)$, α_k=entero no negativo y

$$|\alpha| = \sum_{k=1}^m \alpha_k \quad ;$$

con esto escribimos

$$D^\alpha = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \ldots \partial x_m^{\alpha_m}}$$

cada símbolo D^α representa una derivada parcial de orden $|\alpha|$, por ejemplo si $\alpha=(1,0,2,0,\ldots,0)$ tenemos

$$D^\alpha = \frac{\partial^3}{\partial x_1\, \partial x_3^2} \ .$$

Denotamos por

$$\sum_{|\alpha| \le k} D^\alpha$$

la suma de todas las posibles derivadas parciales de orden $|\alpha| \le k$, por ejemplo en R^2

$$\sum_{|\alpha|\le 2} D^\alpha f = f + \frac{\partial f}{\partial x_1} + \frac{\partial f}{\partial x_2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \ .$$

Ahora sobre $C_0^\infty(\Omega)$ definimos el producto interior

$$\langle f | g \rangle_k = \sum_{|\alpha|\le k} \langle D^\alpha f | D^\alpha g \rangle = \sum_{|\alpha|\le k} \int_\Omega (D^\alpha f)^* D^\alpha g\, dx,$$

y al pre-espacio de Hilbert correspondiente lo denotamos por $(\overset{\circ}{W}_{k,0}(\Omega),\langle .,.\rangle_k)$, la norma respectiva es $\|\cdot\|_k$.

Los espacios $W_{k,0}(\Omega)$. Al espacio de funciones infinitamente diferenciables en la cerradura ($\overline{\Omega}$) de la región Ω le llamamos $C^\infty(\overline{\Omega})$ y es un espacio vectorial que contiene a $C_0^\infty(\Omega)$, sus elementos pueden ser funciones como

$$e^{-|x|^2} \;;\; x^{\alpha} = x_1^{\alpha_1} \dots x_m^{\alpha_m} \;;\; \cos|x|^2$$

que pertenecen a cualquier $C_0^{\infty}(\overline{\Omega})$.

El pre-espacio de Hilbert $(W_{k,0}(\Omega), \langle .,. \rangle_k)$ se define como el espacio vectorial $C^{\infty}(\overline{\Omega})$ provisto del producto interior $\langle .,. \rangle_k$.

§2. Espacios de Hilbert

1. Espacios métricos completos

En cada pre-espacio de Hilbert $(H_0, \langle .,. \rangle_\alpha)$ la métrica inducida por el producto interior

$$d(x,y) = \|x-y\|_\alpha = \langle x-y \mid x-y \rangle_\alpha^{1/2}$$

permite recuperar muchos de los conceptos asociados a espacios métricos, como son convergencia, conjuntos abiertos, cerrados y compactos, etc., por claridad enunciaremos algunos de estos conceptos.

Def. La sucesion $\{f_k\} \subset H_0$ se llama convergente a $f \in H_0$ si satisface

$$\lim \|f_k - f\|_\alpha = 0 .$$

Def. Una sucesión $\{f_k\}$ se llama sucesión de Cauchy si para cada $\varepsilon > 0$ existe una $n_0 \in \mathbb{N}$ para la cual se cumple

$$\|f_k - f_m\|_\alpha < \varepsilon \quad , \quad \text{para} \quad m, k \geq n_0 \;;$$

que es equivalente a $\lim\limits_{k,m} \|f_k - f_m\|_\alpha = 0$.

Es inmediato que toda sucesión convergente es una sucesión de Cauchy, pero no toda sucesión de Cauchy es una sucesión convergente, ya que al hablar de convergencia estamos afirmando que existe un elemento del espacio H_0 al cual converge la sucesión.

Un ejemplo elemental de sucesión de Cauchy no convergente es la sucesión en Q (los racionales)

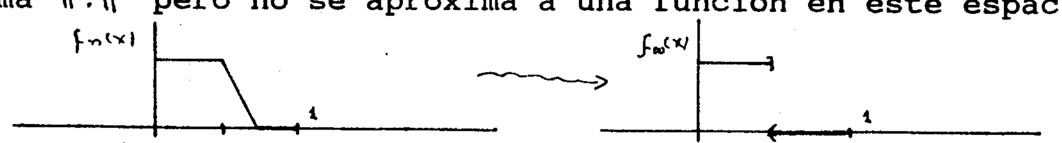
$$\{1. \;, 1.4 \;, 1.41 \,, 1.4142 \,, \dots\}$$

que no converge a un elemento en Q, sabemos que converge a $\sqrt{2}$.

Otro ejemplo más interesante es la sucesión de funciones

$$f_n(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x \leq 1/2 \\ 1 - (x - 1/2)\, n & 1/2 < x < 1/2 + 1/n \\ 0 & 1/2 + 1/n \leq x \leq 1 \end{cases}$$

en el espacio C[0,1] de funciones continuas en [0,1] con el producto interior de $L2_0(0,1)$, es una sucesión de Cauchy en la norma $\|.\|$ pero no se aproxima a una función en este espacio



Estos ejemplos llevan al importante concepto de espacio métrico completo (recuérdese que un pre-espacio de Hilbert es un espacio métrico).

Def. Un Pre-espacio de Hilbert $(H_0,<.,.>_\alpha)$ se llama completo si cada sucesión de Cauchy converge a un elemento del propio espacio.

El ejemplo clásico de espacio matrico completo son los números reales, le siguen R^m y los complejos $\mathbb{C}^m$,otro ejemplo es el espacio ℓ_2 que es el prototipo de espacio de Hilbert con que trabajaremos.

Def. Un pre-espacio de Hilbert $(H,<.,.>_\alpha)$ que es completo en la métrica inducida por el producto interior $<.,.>_\alpha$ se llama simplemente ESPACIO DE HILBERT.

Def. Un espacio vectorial H con una norma $\|\cdot\|_\alpha$ (espacio normado) se llama espacio de Banach si es completo en la métrica inducida por la norma $\|\cdot\|_\alpha$.

Nota. Todo espacio de Hilbert es un espacio de Banach, pero como no siempre es posible definir un producto interior en un espacio normado se tiene que no todo espacio de Banach es un espacio de Hilbert.

Los espacios R^m, ℓ_2 , con el producto interior usual son espacios de Hilbert y por tanto de Banach.

2. Nociones topológicas

Los espacios $L2_0(\Omega)$ y $W^0_{1,0}(\Omega)$ son espacios que no son completos pero pueden ampliarse a espacios más grandes que sí son completos. La manera de obtener un espacio métrico completo apartir de uno "no completo" es sencilla y es exactamente la misma que se usa para construir los números reales, tal método no lo expondremos aquí,sólo daremos algunos conceptos involucrados en tal construcción que usaremos para estudiar formas sesquilineales y operadores. En la discusión siguiente $(H,<.,.>)$ es un pre-espacio de Hilbert y $\|.\|$ su norma.

Def. La bola abierta B(x,r) con centro en $x\in H$ y radio=r es el conjunto $B(x,r)=\{y\in H \mid \|x-y\|<r\}$.

Def. La bola cerrada $\bar{B}(x,r)$ con centro en x y radio r es

$$\bar{B}(x,r)=\{y\in H \mid \|x-y\|\leq r\} .$$

Def. Un punto interior x del conjunto A es aquel para el cual existe una bola abierta B(x,r>0) que esta contenida en A.

Def. Un conjunto $A\subset H$ se llama abierto cuando todos sus elemntos son puntos interiores del propio conjunto A.

Def. Un conjunto es cerrado cuando su complemento es abierto.

Otra manera de caracterizar a los conjuntos cerrados la da el concepto de punto de acumulación.

Def. Un punto x se llama punto de acumulación del conjunto A si para cada r>0 la bola B(x,r) continene almenos un punto de A.

Def. La cerradura de un conjunto A se define como el conjunto de puntos de acumulación de A, y se denota por $\bar{A}$.

Es evidente que $\bar{A}\supseteq A$.

Proposición. Un conjunto A es cerrado si y sólo si $\bar{A}=A$.

Def. El conjunto A se llama DENSO EN B si $\bar{A}\supset B$, y cuando $\bar{A}=H$ simplemente se llama DENSO.

Def. Un espacio H se llama separable cuando tiene un conjunto NUMERABLE y DENSO.

Los racionales forman un conjunto numerable y denso en los reales por lo cual estos forman un espacio separable, apartir de lo cual es inmediata la prueba de que R^m y ℓ_2 son espacios de Hilbert SEPARABLES. La separabilidad de un espacio de Hilbert es importante para probar que siempre existe una base ortonormal numerable como en el caso de R^m .

Hasta aquí los conceptos dados dependen únicamente de la noción de distancia (métrica) entre dos elementos y si a esto agregamos la estructura de espacio vectorial tenemos los siguientes conceptos.

Def. Un subespacio M de H es cerrado cuando es cerrado en H como subconjunto, de manera análoga podemos tener subespacios abiertos y DENSOS.

Teorema. La cerradura de un subespacio es un subespacio.

Teorema. Un subespacio M de $(H,<.,.>)$ es cerrado si y sólo si $(M,<.,.>)$ es un espacio de Hilbert , con las mismas operaciones de H.

Def. Denotamos por L(M) al conjunto de combinaciones lineales FINITAS de los elementos de M :

$$L(M)=\{ f=\sum_{k=1}^{N} c_k f_k \mid N\in \mathbb{N} \ , \ c_k\in \mathbb{C} \quad y \ f_k\in M\}.$$

3. Complesión de un espacio. Los espacios $(L2(\Omega),<.,.>)$, $(W_k^o(\Omega),<.,.>_k)$ y $(W_k(\Omega),<.,.>_k)$

Hemos visto que los racionales dejan "huecos" el la recta real, no son completos, pero pueden incluirse en los reales ,que es un espacio completo, y que preservan las mismas operaciones de espacio vectorial de los racionales; a los reales le llamamos la complesión de los racionales.

Def. Sea $(H_o,<.,.>_\alpha)$ un pre-espacio de Hilbert, el espacio de Hilbert $(H,<.,.>)$ se llama complesión de H_o si

i) H_o es un subespacio de H
ii) el producto interior $<.,.>_\alpha$ en H_o es una restricción del producto interior $<.,.>$ de H

$$\langle f|g\rangle_\alpha=\langle f|g\rangle \quad para \quad f,g\in H_o$$

iii) H_o es DENSO en H : $\bar{H}_o=H$.

Teorema. Todo pre-espacio de Hilbert posee una complesión que es un espacio de Hilbert.

Nota. Como complesión de $(H_0 <.,.>_\alpha)$, $(H,<.,.>)$ es un espacio métrico completo y además es un espacio de Hilbert, lo que significa que las operaciones de espacio vectorial y el producto escalar en H_0 son extendidas a los elementos de H.

Nota. El teorema anterior solo afirma la existencia de la complesión pero no da detalles sobre los nuevos elementos que completan al espacio original, por ejemplo sabemos que los irracionales pueden definirse apartir de sucesiones de decimales no periódicas .

El espacio $(L2(\Omega),<.,.>)$.

La complesión del pre-espacio de Hilbert $L2_0(\Omega)$ se llama $L2(\Omega)$. La caracterización precisa de los elementos de $L2(\Omega)$ la da la INTEGRAL DE LEBESGUE, que es un concepto de integración más general que el de Riemann en varios aspectos y se basa en la teoría de la medida, no expondremos tal teoría de integración por ser extensa, sólo diremos que cuando Ω es una regiÁn conexa-abierta y de frontera suave (en caso de ser acotada) la integral de Lebesgue de una función continua y la de Riemann son exactamente la misma de manera que al trabajar en $C_0^\infty(\Omega)$ podemos usar la integral de Riemann.

$L2(\Omega)=$ {conjunto de funciones de cuadrado integrable en

el sentido de Lebesgue : $\int |f(x)|^2 dx < \infty$ }.

Por definición de $L2(\Omega)$, el conjunto $C_0^\infty(\Omega)$ es denso en la métrica inducida por $<.,.>$;y el producto interior $<.,.>$ entre dos elementos u(x) y v(x) de $L2(\Omega)$ se puede definir como

$$\langle u|v\rangle = \int_\Omega u^* v\, dx = \lim \langle u_n | v_n\rangle$$

donde $\{u_K\},\{v_K\}$ son sucesiones en $C_0^\infty(\Omega)$ que convergen a u y v respectivamente. De manera análoga se definen las operaciones de espacio vectorial (suma y producto por un escalar).

$$\alpha u + \beta v = \lim (\alpha u_n + \beta v_n).$$

El espacio $(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$.

La complesión de $W_{1,0}^0(\Omega)$ en la métrica $\|\cdot\|_1$ se denota por $W_1^0(\Omega)$ y se llama espacio de Sobolev. Aquí debemos precisar como se define el producto interior ya que los elementos de $W_1^0(\Omega)$ no siempre tienen derivas en el sentido clásico.

Decimos que $u_j(x) \in L2(\Omega)$ es la primera derivada parcial de u(x) respecto a x_j si satisface

$$\langle u_j|\varphi\rangle = \langle u|\frac{\partial\varphi}{\partial x_j}\rangle \quad \text{o} \quad \int_\Omega u_j^* \varphi\, dx = \int u^* \frac{\partial\varphi}{\partial x_j} dx \quad \text{para cada } \varphi \in C_0^\infty(\Omega);$$

$u_j(x)$ es mejor conocida como la derivada GENERALIZADA o DISTRIBUCIONAL de u(x).

Si u(x) y v(x) pertenecen a $W_1^0(\Omega)$ el producto interior se define como

$$\langle u|v\rangle_1 = \langle u|v\rangle + \sum_{j=1}^m \langle u_j|v_j\rangle = \lim \left\{\langle u_n|v_n\rangle + \langle\nabla u_n|\nabla v_n\rangle\right\};$$

donde $\{u_n\},\{v_n\}$ son sucesiones de Cauchy en $C_0^\infty(\Omega)$ que convergen a $u(x)$ y $v(x)$ respectivamente, y $u_j(x),v_j(x)$ son las derivadas distribucionales.

Nota. El concepto de derivada distribucional es muy general y no siempre puede asociarse a una función en un sentido ordinario, por ejemplo la derivada distribucional de la funcion escalón unitario es la delta de Dirac, que no es una función en el sentido riguroso de la palabra. La característica de la primera derivada distribucional de los elementos de $W_1^0(\Omega)$ es que puede identificarse con un único elemento de $L2(\Omega)$. Puede mostrarse que $W_1^0(\Omega)$ es el conjunto de funciones de $L2(\Omega)$ cuyas primeras derivadas distribucionales son elementos de L2( ).

Trazas de funciones de $W_1^0(\Omega)$. Si $u\in C_0^\infty(\Omega)$ entonces

$$u(\partial\Omega)=0 \qquad , \; u(\partial\Omega)= \text{función de } m-1 \text{ variables},$$

otra manera de ver lo anterior es mediante la función

$$T_r : C_0^\infty(\Omega) \longrightarrow L_2(\partial\Omega) : u \longrightarrow T_r u = 0$$

que asocia a cada $u\in C_0^\infty(\Omega)$ con la función cero en $L2(\partial\Omega)$, este planteamiento permita probar que a cada elemento $u\in W_1^0(\Omega)$ puede asociársele un único elemento $u(\partial\Omega)\in L2(\partial\Omega)$ (llamado traza de $u(x)$) que es precisamente la función cero en $L2(\partial\Omega)$.

Cuando $u\in W_1^0(\Omega)$, al escribir

$$u(\partial\Omega)=0$$

nos referimos a la traza de $u(x)$ en $L2(\partial\Omega)$.

Con lo anterior la fórmula de Green puede extenderse a elementos $u(x)$ y $v(x)$ de $W_1^0(\Omega)$ como

$$\int_\Omega u^* \frac{\partial v}{\partial x_j}\,dx = \int_{\partial\Omega} u(\partial\Omega)^*\, v(\partial\Omega)\, n_j\, dS - \int_\Omega \frac{\partial u^*}{\partial x_j} v\,dx = -\int_\Omega \frac{\partial u^*}{\partial x_j} v\,dx$$

donde $u(\partial\Omega)$ y $v(\partial\Omega)$ son la trazas de $u(x)$ y $v(x)$ respectivamente; n_j es la componente en la dirección x_j de la normal exterior a $\partial\Omega$.

Los espacios $(W_K^0(\Omega),\langle .,.\rangle_K)$.

Los espacios de Sobolev $W_K^0(\Omega)$ son la complesión de $W_{k,0}^0(\Omega)$ con la métrica inducida por el producto interior $\langle .,.\rangle_K$. Puede mostrarse que las derivadas distribucionales de orden$\leq$k-1 tienen trazas idénticamente nulas (función cero en $L2(\partial\Omega)$) :

$$D^\alpha u(\partial\Omega)=0 \qquad \text{para} \quad |\alpha|\leq K-1.$$

El producto interior entre $u(x),v(x)\in W_K^0(\Omega)$ es

$$\langle u|v\rangle_K = \lim \left\{ \sum_{|\alpha|\leq K} \langle D^\alpha u_n | D^\alpha v_n\rangle \right\} = \sum_{|\alpha|\leq K} \langle D^\alpha u | D^\alpha v\rangle$$

donde $\{u_n\},\{v_n\}$ son sucesiones de Cauchy en $C_0^\infty(\Omega)$ que convergen a $u(x)$ y $v(x)$ respectivamente y $D^\alpha u$,$D^\alpha v$ son las derivadas distribucionales.

Los espacios $(W_K(\Omega),\langle .,.\rangle_K)$.

Los espacios de Sobolev $W_K(\Omega)$ son la complesión de $W_{K,0}(\Omega)$ con el producto interior $\langle .,.\rangle_K$, y pueden definirse como el conjunto de elementos de $L2(\Omega)$ cuyas derivadas distribucionales hasta orden k son elementos de $L2(\Omega)$.

La traza de cada $u \in W_k(\Omega)$ es la función $u(\partial\Omega) \in L2(\partial\Omega)$ no necesariamente nula, por ejemplo $u(x)=e^{-|x|^2}$ tiene traza no nula.

Nota. Los elementos de los espacios de Sobolev $W_k(\Omega)$ son elementos de $L2(\Omega)$, pero como espacios de Hilbert $(W_k(\Omega),<.,.>_k)$ y $(L2(\Omega),<.,.>)$ son distintos, además vistos como conjuntos tenemos $W_k(\Omega) \subset W_{k+1}(\Omega)$.

Nota. Por definición $C_0^\infty(\Omega)$ $(C^\infty(\bar{\Omega}))$ es una conjunto DENSO en cada espacio $\mathring{W}_k(\Omega)$ $(W_k(\Omega))$, por lo que las operaciones de espacio vectorial y las que involucren derivadas hasta orden k entre elementos de $C_0^\infty(\Omega)$ ($C_0^\infty(\bar{\Omega})$) pueden extenderse a todos los elementos de $\mathring{W}_k(\Omega)$ $(W_k(\Omega))$ como en el caso del producto interior, este argumento de densidad será usado en muchas demostraciones, lo que reduce todo a trabajar con $C^\infty(\bar{\Omega})$ y $C_0^\infty(\Omega)$.

El teorema siguiente muestra una de las propiedes importantes de los espacios $L2(\Omega)$, $\mathring{W}_k(\Omega)$ y $W_k(\Omega)$.

Teorema. Los espacios $(L2(\Omega),<.,.>)$, $(\mathring{W}_k(\Omega),<.,.>_k)$ y $(W_k(\Omega),<.,.>_k)$ son SEPARABLES, es decir tienen un subconjunto NUMERABLE y DENSO.

4. Teorema de Proyección

El concepto de producto interior permite hablar del concepto de ortogonalidad de sencilla intepretación geométrica y de implicaciones muy importantes en la teoría de espacios de Hilbert. En lo que resta del capítulo $(H,<.,.>)$ será un espacio de Hilbert completo.

Def. Dos elementos $f,g \in H$ son ortogonales si $<f,g>=0$, $f \in H$ es ortogonal al conjunto $A \subset H$ si es ortogonal a cada elemento de A y finalmente dos conjuntos son ortogonales si sus elementos respectivos son ortogonales.

Notación. Sea $A \subset H$ un conjunto arbitrario, el complemento ortogonal de A se define como el conjunto de todos lo elementos en H que son ortogonales a A y se denota por $A^\perp$.

Proposición .
a) $\{0\}^\perp=H$

b) si $A \subset H$ es un conjunto arbitrario entonces $A^\perp$ es cerrado

c) $A \subset B$ implica $B^\perp \subset A^\perp$

d) $A^\perp = L(A)^\perp = \overline{L(A)}^\perp$.

El siguiente resultado es obvio en R^n y se cumple en espacios de Hilbert generales.

Teorema de Proyección. Sea $(H,<.,.>)$ un espacio de Hilbert y A un subespacio cerrado Entonces

i) $A^{\perp\perp} = A$

ii) cada $f \in H$ tiene una expresión única de la forma

$$f = f_1 + f_2$$

donde $f_1 \in A$ y $f_2 \in A^{\perp}$.

Def. Sean T_1, T_2 subespacios tales que $T_1 \cap T_2 = \{0\}$, la suma directa de T_1 y T_2 es el subespacio

$$T_1 + T_2 = \{ f_1 + f_2 \mid f_1 \in T_1 \text{ y } f_2 \in T_2 \}.$$

Cuando T_1 y T_2 son ortogonales la suma directa se llama suma ortogonal y se denota como $T_1 \oplus T_2$, en este caso el teorema de proyección puede enunciarse de la siguiente manera.

Teorema. Si T es un subespacio cerrado entonces
i) $H = T_1 \oplus T^{\perp}$

ii) cada elemento $f \in H$ tiene una expresión única de la forma

$$f = f_1 + f_1^{\perp} \quad , \; f_1 \in T \text{ y } f_1^{\perp} \in T^{\perp}.$$

5. Bases y sistemas ortonormales

Def. El conjunto $\{\hat{e}_\alpha\}_{\alpha \in \mathbb{N}}$ se llama ortonormal si satisface

$$\langle \hat{e}_\alpha | \hat{e}_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \;;$$

donde $\delta_{\alpha\beta}$ es la delta de Kronecker.

En espacios de dimensión finita R^m sabemos que existen conjuntos ortonormales con m elementos a lo más, que se pueden obtener apartir de conjuntos linealmente independientes por el método de Gram-Schmidt, este método también puede aplicarse en espacios de dimensión infinita.

Teorema. Cada conjunto numerable de elementos linealmente independientes puede ortonormalizarse por el método de gram-Schmidt para obtener un sistema ortonormal.

En espacios de dimensión finita R^m sabemos que existe un conjunto ortonormal de m elementos con los cuales cada elemento $x \in R^m$ tiene una expresión única de la forma

$$x = \sum_{K=1}^{m} x_K \hat{e}_K \;,$$

lo que lleva al concepto de base. En espacios de dimensión infinita cada suma

$$x = \sum_{K=1}^{\infty} x_K \hat{e}_K$$

se entiende en el sentido de convergencia en la métrica del espacio

$$\lim_N \| x - \sum_{K=1}^{N} x_K \hat{e}_K \| = 0.$$

Def. Un sistema <u>orto</u>normal $M = \{e_K | K \in \mathbb{N}\}$ se llama Base del Subespacio A si $\overline{L(M)} \supset A$, y se llama simplemente Base Ortonormal de H (B.O.N.) si $\overline{L(M)} = H$.

Nótese que $L(M)$ sólo incluye combinaciones lineales finitas por tanto cada $\tilde{f} \in L(M)$ es de la forma

$$\tilde{f} = \sum_{K=1}^{N} f_K \hat{e}_K \;,$$

y al ser M una B.O.N. de H entonces para cada $f \in H$ existe una sucesión $\{\tilde{f}_N\}$ en $L(M)$ tal que

$$\lim \|f - \tilde{f}\| = 0 \quad \Leftrightarrow \quad f = \sum_{K=1}^{\infty} f_K \hat{e}_K$$

es claro que cada $\tilde{f}_N$ es de la forma

$$\tilde{f}_N = \sum_{K=1}^{N} \langle \hat{e}_K | f \rangle \hat{e}_K .$$

Hasta aquí hemos supuesto que la B.O.N. existe y es numerable, el teorema siguiente da la propiedad del espacio H que garantiza la existencia de tal B.O.N. .

Teorema. Un espacio de Hilbert (H,<.,.>) es SEPARABLE si y sólo si posee una B.O.N. NUMERABLE.

Del teorema de proyección y el anterior se deduce que si $\{e_K\}$ es una B.O.N. numerable del espacio H entonces

$$H = L(\hat{e}_1) \oplus L(\hat{e}_2) \oplus \ldots\ldots$$

La dimensión de un espacio de Hilbert es la cardinalidad de la B.O.N. que posee.

Ejemplos típicos de espacios separables son R^m y ℓ_2 en los cuales la base ortonormal canónica es

$$\hat{e}_K = (0, \ldots, 0, 1_K, 0, \ldots\ldots)$$

Los espacios $L2(\Omega)$, $W_K^{\circ}(\Omega)$ y $W_K(\Omega)$ con sus respectivas métricas son separables y por tanto tienen una B.O.N. numerable.

$3. El espacio dual

---

1. Definición. Teorema de Riez

Def. Un funcional lineal continuo sobre un espacio de Hilbert es una función lineal y continua que va de (H,<.,.>) en los complejos

$$F : H \longrightarrow \mathbb{C} \quad , \quad F(\alpha f + \beta g) = \alpha F(f) + \beta F(g) ,$$

y de la definición de continuidad se sigue que para cada $\varepsilon > 0$ existe una $\delta > 0$ para la cual se cumple

$$\|f - g\| < \delta \quad \text{implica} \quad |F(f) - F(g)| = |F(f-g)| < \varepsilon ,$$

donde $\|.\|$ es la norma inducida por <.,.>.

Def. El espacio DUAL H^* a un espacio de Hilbert (H,<.,.>) es el conjunto de funcionales lineales continuas.

Proposición. H^* es un espacio vectorial .

El concepto de acotación de un funcional da un criterio de continuidad que es más fácil de verificar.

Def. Una funcional lineal F se llama ACOTADO si existe una constante $C \geq 0$ con la cual se cumple para cada $f \in H$

$$|F(f)| \leq C \|f\| .$$

Teorema. Una funcional lineal sobre un espacio de Hilbert es continuo si y sólo si es acotado.

La equivalencia entre acotación y continuidad depende sólo de la linealidad del funcional.

La acotación de cada funcional continuo permite introducir una norma en el espacio H^* definida por

$$\|F\|^* = \sup_{\|g\|=1} |F(g)| = \sup_{g\neq 0} \frac{|F(g)|}{\|g\|} .$$

Teorema. $(H^*, \|.\|^*)$ es un espacio de Banach :
 i) es un espacio vectorial
ii) es completo en la métrica inducida por la norma $\|\cdot\|^*$.

La estructura de espacio de Hilbert de H permite decir más sobre H^*.

Teorema (Riez). Para cada elemento $F\in H^*$ existe un único elemento $f\in H$ que satisface

i) $\|F\|^* = \|f\|$

ii) $F(x) = \langle f,x\rangle$ para cada x H.

iii) El producto interior en H^* se define como

$$\langle F|G\rangle \equiv \langle f|g\rangle$$

para $F,G\in H^*$ y $f,g\in H$ los elementos correspondientes.

El teorema de Riez afirma que los espacios H y H^* son esencialmente el mismo espacio de Hilbert .

2. Convergencia débil

Tanto en H como en H^* hemos introducido el concepto de convergencia en la norma (o métrica) de cada espacio, pero hay otro concepto de convergencia de sucesiones.

Def. $\{x_n\}\subset H$ se llama débilmente convergente a $x\in H$ si cumple

$$\lim \langle x_n|f\rangle = \langle x|f\rangle \quad \text{para cada } f\in H.$$

Para sucesiones de funcionales tenemos :

Def. $\{F_n\}\subset H^*$ se llama débilmente convergente a $F\in H^*$ si cumple

$$\lim F_n(x) = F(x) \quad \text{para cada } x\in H.$$

Como su nombre lo indica la convergencia débil es más fácil de satisfacer que la convergencia en norma.

Proposición. Toda sucesión convergente en la norma de un espacio de Hilbert es una sucesión debilmente convergente.

El recíproco es falso en general, como ilustra el ejemplo siguiente.

Ejemplo. En ℓ_2 la base canónica $\{\hat{e}_k\}$ es débilmente convergente ya que para cada $f\in\ell_2$ la suma siguiente es absolutamente convergente

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\langle\hat{e}_k|f\rangle|^2 < \infty$$

por tanto el término general $\langle\hat{e}_k,f\rangle$ de la serie converge a cero

$$\lim \langle\hat{e}_k|f\rangle = 0 \quad , \text{para cada } f\in\ell_2;$$

pero la base canónica no tiene ningún punto de acumulación; es decir, no existe un punto al que converjan los $\hat{e}_k$ ya que su distancia nunca tiende a cero

$$\|\hat{e}_k - \hat{e}_m\| = \sqrt{2} \;, \quad \text{para} \quad m \neq k .$$

---

§4. Teoría de formas sesquilineales

La teoría de formas sesquilineales es un campo muy fecundo para estudiar operadores diferenciales e integrales ya que es de interpretación y aplicaciones muy sencillas. Por otro lado, muchos del los conceptos involucrados tiene una extensión o aplicación en la teoría de operadores lineales.

1. Formas sesquilineales acotadas

Def. El dominio D(h) de una f.s.l. h(.,.) sobre el espacio de Hilbert (H,<.,.>) es el conjunto de elementos de H para los cuales está definida. Si D(h) es un conjunto denso en H decimos que la f.s.l. h(.,.) es DENSAMENTE DEFINIDA .

Def. Decimos que la f.s.l. h_1 es la restricción de h_2 (o h_2 es una extensión de h_1) si

$$D(h_1) \subset D(h_2) \quad y \quad h_1(u,v) = h_2(u,v) \quad \text{para} \quad u,v \in D(h_1).$$

Def. Una f.s.l. h(.,.) se llama acotada en el espacio (H,<.,.>) si existe una constante $C \geq 0$ tal que

$$|h(u,v)| \leq C \, \|u\| \cdot \|v\| ,$$

donde $\|\cdot\|$ es la norma inducida por <.,.>. Al más pequeño de los C se le llama norma de h(.,.) y se denota $\|h(.,.)\|$.

Ejemplo. La f.s.l. $h_0(.,.)$ dada por

$$D(h_0) = C_0^\infty(-n,n) \;, \quad h_0(u,v) = \left\langle \frac{du}{dx} \middle| \frac{dv}{dx} \right\rangle = \int_{-n}^{n} \frac{du^*}{dx} \frac{dv}{dx} \, dx$$

es acotada en $W_1^0(-n,n)$, y por densidad de $C_0^\infty(-n,n)$ h_0 puede extenderse a todo $W_1^0(-n,n)$ dando lugar a la f.s.l. $\bar{h}_0$

$$D(\bar{h}_0) = W_1^0(-n,n) \;; \quad \bar{h}_0(u,v) = \left\langle \frac{du}{dx} \middle| \frac{dv}{dx} \right\rangle ,$$

donde las derivadas son distribucionales.

Cuando una f.s.l. $h_0(.,.)$ densamente definida es acotada, puede extenderse a una f.s.l. $\bar{h}_0(.,.)$ que es acotada en todo el espacio H, como en el ejemplo anterior.

Teorema. Cada f.s.l. h(.,.) densamente definida y acotada en un espacio de Hilbert (H,<.,.>) tiene una única extension acotada en todo el espacio, que denotamos por $\bar{h}(.,.)$.

Por este teorema al trabajar con una f.s.l. densamente definida y acotada automáticamente asumiremos que el dominio es todo el espacio y es acotada en el mismo.

Ejemplo. En cada espacio de Hilbert la f.s.l. acotada más sencilla es la que define precisamente al producto interior de H

$$h(u,v) = \langle u,v \rangle \;; \quad |h(u,v)| \leq \|u\| \cdot \|v\| \quad (\text{por Schwartz}).$$

Ejemplo. Cada función q(x) continua y acotada en Ω define una forma sesquilineal acotada en L2(Ω) :

$$|\langle qu|v\rangle| \leq \int_{\Omega} |q|\cdot|uv|\,dx \leq q_{max}\,\|u\|\cdot\|v\| \quad ; \quad |q(x)| \leq q_{max}.$$

Ejemplo. La f.s.l dada por

$$D(h_0) = C_0^{\infty}(\Omega) \quad , \quad h_0(u,v) = \langle \nabla u | \nabla v\rangle$$

es acotada en ($W_1^0(\Omega)$,<.,.>$_1$) pero no es acotada en L2(Ω), este es un ejemplo de lo que haremos para estudiar f.s.l. y operadores no acotados: cambiamos a un espacio donde sean acotados.

2. Formas sesquilineales no acotadas, cerradas y cerradura de una forma

Muchas de las f.s.l. no acotadas que aparecen en aplicaciones están asociadas a los operadores diferenciales de la Física, de manera que el estudio de tales operadores esta estrechamente vinculado al estudio de las f.s.l. respectivas.

Los conceptos de dominio, extensión y acotación dados anteriormente son los mismos para formas sesquilineales no acotadas, pero en caso de ser densamente definidas no pueden extenderse a todo el espacio,de lo contrario serian acotadas lo cual es absurdo. Por esta razón al manipular algebraicamente formas sesquilineales debemos precisar el dominio en el cual tales operaciones tienen sentido.

Def. La suma de dos formas sesquilineales h_1 y h_2 se define como la f.s.l. h_1+h_2 dada por

$$D(h_1+h_2) = D(h_1)\cap D(h_2) \quad ; \quad (h_1+h_2)(u,v) = h_1(u,v) + h_2(u,v) \quad ,$$

donde se toma $D(h_1)\cap D(h_2)$ para asegurar que h_1 y h_2 esten definidas .

La f.s.l. CONSTANTE=b se define usando el producto interior <.,.> del espacio H como

$$D(b) = H \quad , \quad b(u,v) = b\,\langle u,v\rangle.$$

Es claro que la suma de cada f.s.l. h(.,.) con una f.s.l. contante siempre está bien definida en el dominio de la primera.

Def. Una f.s.l h(.,.) simétrica se llama acotada por abajo por b si

$$h(u,u) = E(u) \geq b\,\langle u|u\rangle = b\,\|u\|^2 \quad \text{para cada } u\in D(h),$$

en notación $h\geq b$.

La familia de f.s.l. acotadas por abajo sigue en importancia de propiedades a las formas acotadas, y ello se debe a que sumándoles una constante apropiada definen un producto interior en su dominio lo que da un pre-espacio de Hilbert cuya complesión (espacio de Hilbert) tiene muchas propiedades de interesantes.

Proposición. Cada f.s.l. h(.,.) acotada por abajo por b define un producto interior en su dominio D(h) (que es un espacio vectorial) para cada $\alpha<b$ dado por

$$\langle u|v\rangle_h = h(u,v) - \alpha\langle u|v\rangle \quad , \quad u,v\in D(h).$$

Notación. Al producto interior inducido en D(h) por la f.s.l. h le denotamos por $<.,.>_h$ y asumimos que está dada para alguna α como afirma el teorema anterior.

Cerradura de una forma. Como vimos en $1.2 cada pre-espacio de Hilbert $(D(h),<.,.>_h)$ tiene una complesión que es un espacio de Hilbert denotado por D(h), en tal espacio completo la f.s.l. h(.,.) es la restricción de una f.s.l. $\bar{h}$ que llamamos la cerradura de h en alusión a que $\overline{D(h)}$ es completo (o de manera equivalente $\overline{D(h)}=D(\bar{h})$ es cerrado).

Ejemplo. La la f.s.l. $h:L2(\Omega)xL2(\Omega)\text{-->}\mathbb{C}$

$$D(h_0)=C_0^\infty(\Omega) \quad , \quad h_0(u,v)=\langle\nabla u,\nabla v\rangle$$

es simétrica y acotada por abajo por el cero, de manera que

$$\langle u,v\rangle_h = h_0(u,v) - \alpha\langle u,v\rangle \qquad , \alpha< 0$$

define un producto interior en $C_0^\infty(\Omega)$. Haciendo $\alpha=-1$ tenemos

$$\langle .,.\rangle_h = \langle .,.\rangle_1$$

por tanto la complesión de $(C_0^\infty(\Omega),<.,.>_h)$ es el espacio de Sobolev $(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$, en el cual el producto interior

$$\langle u,v\rangle_1 = \langle\nabla u,\nabla v\rangle + \langle u,v\rangle \quad \text{(derivadas distribucionales)}$$

define la extensión de $h_0(.,.)$ dada por

$$D(\bar{h}_0)=W_1^0(\Omega) \; , \; \bar{h}_0(u,v)=\langle\nabla u,\nabla v\rangle \quad \text{(derivadas distribucionales)}$$

que es la cerradura de $h_0(.,.)$.

Def. Una forma h(.,.) simétrica y acotada por abajo se llama cerrada si $(D(h),<.,.>_h)$ es un espacio de Hilbert, donde $<.,.>_h$ es el producto interior asociado a h(.,.).

Def. La forma h(.,.) se llama cerradura de $h_0(.,.)$ si satisface

i) es cerrada
ii) es una extesión de $h_0(.,.)$.

Ejemplo. La f.s.l. definida por el potencial x^2

$$D(h_0)=C_0^\infty(R) \quad , \quad h_0(u,v)=\langle x^2u|v\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2u^*v\,dx$$

no es acotada en L2(R), pero es acotada por abajo por el cero por tanto el pre-espacio de Hilbert $(C_0^\infty(R),<.,.>_h)$ tiene una complesión que es un espacio de Hilbert .

Nota. Una aplicaciÂn importantísima de la teoría de formas sesquilineales acotadas por abajo es la prueba de existencia y unicidad de soluciones débiles a ecuaciones diferenciales parciales con valores en la frontera, la cual se basa en trabajar en el espácio $(\overline{D(h)},<.,.>_h)$ definido por la complesión de $(D(h),<.,.>_h)$ (Cap. IV).

Def. La f.s.l. t(.,.) se llama acotada relativamente por la f.s.l. h(.,.) si cumple

i) $D(t)\supset D(h)$

ii) $|t(u,u)| \leq a\|u\|^2 + b\,|h(u,u)|$; $a, b \geq 0$ y $u \in D(h)$;
al valor más pequeño de las b para las cuales se cumple la desigualdad se le llama h-cota de t(.,.).

Ejemplo. Cualquier f.s.l. t(.,.) acotada en la norma del espacio tiene h-cota cero para cada f.s.l. h(.,.) no acotada, ya que

$$|t(u,u)| \leq C\,\|u\|^2 + (0)\,|h(u,u)| = \|t\| \cdot \|u\|^2.$$

§1. El espacio de operadores lineales acotados $B(H_1,H_2)$

1. Conceptos

Def. Sean H_1, H_2 espacios de Hilbert. Un operador $T:H_1 \to H_2$ es una función lineal de H_1 en H_2. El conjunto de elementos en H_1 para los cuales está definido T se llama dominio D(T) y la imagen $T(D(T)) \subset H_2$ se llama rango $\text{Rango}(T)=\{Tf \mid f\in T\}$. En particular cuando $T:H_1 \to \mathbb{C}$, a T se le llama funcional (I-§3).

Def. Un operador $T:H_1 \to H_2$ se llama densamente definido si su dominio D(T) es un conjunto denso en el espacio H_1.

Def. Un operador $T:H_1 \to H_2$ se llama inyectivo cuando la única solucion de la ecuación

$$Tx=0$$

es x=0, de esta manera el operador inverso T^{-1} está bien definido en $D(T^{-1})=\text{Rango}(T)$ como aquel que satisface

$$T^{-1}\circ Tx=x \quad \text{para } x\in D(T), \quad T\circ T^{-1}y=y \quad \text{para } y\in \text{Rango}(T),$$

donde $T\circ T^{-1}$ es la composición de funciones, además T^{-1} también es un operador lineal.

Def. Un operador $S:H_1 \to H_2$ se llama extensión del operador $T:H_1 \to H_2$ (o el operador T es una restricción de S) cuando se cumple

$$D(T)\subset D(S), \quad Tf=Sf \quad \text{para cada } f\in D(T); \text{notación } T\subset S.$$

Def. El núcleo de una operador $T:H_1 \to H_2$ es el subespacio de H_1

$$\text{Núcleo}(T)=N(T)=\{f\in D(T) \mid f=0\}.$$

Nota. Debe tenerse presente que las propiedades de un operador T dependen de los espacios H_1 y H_2 en que actue, por ejemplo la derivada clásica de una función en $C_0^\infty(\Omega)$ tiene distintas propiedades como operador dependiendo del espacio en que incluyamos a $C_0^\infty(\Omega)$, como puede ser $L2(\Omega)$ o un espacio de Sobolev $W_1^\circ(\Omega)$.

Los espacios de Hilbert en que trabajaremos son $L2(\Omega)$ y los espacios de Sobolev $W_k^\circ(\Omega), W_k(\Omega)$; en tales espacios $C_0^\infty(\Omega)$ y $C^\infty(\overline{\Omega})$ son conjuntos densos con las métricas correspondientes.

Notación. Al referirnos a un espacio de Sobolev como subconjunto de $L2(\Omega)$ escribimos $W_k(\Omega)$ y al mencionarlo como espacio de Hilbert denotamos $(W_k(\Omega),\langle .,.\rangle_k)$. Al operador $T:H \to H$ que actua de un espacio en sí mismo lo denotamos como $T:H\circlearrowleft$.

Ejemplo 1. El operador DERIVADA .

a) El operador $T_0:L2(-n,n) \to L2(-n,n)$

$$D(T_0)=C_0^\infty(-n,n), \quad T_0 f=\frac{d}{dx}f \quad \text{para cada } f\in D(T_0)$$

está bien definido como un operador que asocia a cada $f(x)\in C_0^\infty(-n,n)$ un elemento único de $L2(-n,n)$ que es precisamente su derivada clásica ya que

$$f \in C_0^\infty(-n,n) \text{ implica } \frac{d}{dx} f \in C_0^\infty(-n,n) \subset L_2(-n,n),$$

además T_0 es densamente definido.

b) El operador $T_1:(W_1^0(-n,n),\langle .,.\rangle_1) \dashrightarrow (L2(-n,n),\langle .,.\rangle)$

$$D(T_1) = C_0^\infty(-n,n) \quad ; \quad T_1 f = \frac{d}{dx} f \quad \text{para cada } f \in D(T_1) \; ,$$

como en el caso anterior está bien definido y por densidad de $C_0^\infty(-n,n)$ en $(W_1^0(-n,n),\langle .,.\rangle_1)$ es densamente definido.

c) El operador $T_2:L2(-n,n)\circlearrowleft$

$$D(T_2) = W_1^0(-n,n) \quad , \quad T_2 f = \frac{df}{dx} \quad \text{para cada } f \in D(T_2)$$

donde la derivada es ditribucional, está bien definido ya que la derivada distribucional de $f \in W_1^0(-n,n)$ pertenece a $L2(-n,n)$.

Es inmediato que T_2 es un extensión de T_0 ya que

$$D(T_2) \supset D(T_0) \quad y \quad T_2 f = T_0 f \quad \text{para cada } f \in D(T_0),$$

pero T_2 y T_1 no tienen conexión aparente por actuar entre espacios distintos.

Ejemplo 2. Operador diferencial con condiciones de frontera.

a) El operador minimal $\mathbb{H}_n^0:L2(-n,n)\circlearrowleft$

$$D(\mathbb{H}_n^0) = C_0^\infty(-n,n) \quad , \quad \mathbb{H}_n^0 f = -\frac{d^2}{dx^2} f + q(x) f$$

donde $q(x)$ es continua y real-valuada en $[-n,n]$, está bien definido y es densamente definido.

b) La extensión de Friedrichs $\mathbb{H}_n^1:L2(-n,n)\circlearrowleft$ del operador minimal $\mathbb{H}_n^0$ es

$$D(\mathbb{H}_n^1) = W_1^0(-n,n) \cap W_2(-n,n) \; ; \; \mathbb{H}_n^1 f = -\frac{d^2}{dx^2} f + q(x) f$$

donde las derivadas son distribucionales.

c) La generalización de los operadores $\mathbb{H}_n^0$ y $\mathbb{H}_n^1$ a $L2(B_n)$, donde B_n es la bola en R^m de radio=n con centro en el origen, son

$$D(\mathbb{H}_n^0) = C_0^\infty(B_n) \quad , \quad \mathbb{H}_n^0 f = -\Delta f + q(x) f \quad ; \; -\Delta = \sum_{K=1}^{m} -\frac{\partial^2}{\partial x_K^2} \; ;$$

$$D(\mathbb{H}_n^1) = W_1^0(B_n) \cap W_2(B_n) \; , \; \mathbb{H}_n^1 f = -\Delta f + q(x) f \quad ;$$

en la última ecuación las derivadas son distribucionales.

Ejemplo 3. El operador integral con Kernel $K(x,y)$.

Asumimos que la función $K(x,y):\Omega \times \Omega \dashrightarrow \mathbb{C}$, donde Ω es una región de R^m que puede ser todo R^m, satisface

$$\int_\Omega dx \int_\Omega dy \, |K(x,y)|^2 = M^2 < \infty \; ;$$

es decir, $K(x,y) \in L2(\Omega) \times L2(\Omega)$.

El operador integral $A:L2(\Omega)\circlearrowleft$ con kernel $K(x,y)$ es

$$D(A) = L_2(\Omega) \quad ; \quad Af(x) = \int_\Omega K(x,y) f(y) dy \; ,$$

para mostrar que está bien definido probemos que para cada $f \in L2(\Omega)$, $Af(x)$ también pertenece a $L2(\Omega)$.

Usando la desigualdad de Schwarz tenemos

$$|Af(x)|^2 \leq \cdot \left\{ \int_\Omega |K(x,y)|^2 dy \right\} \cdot \left\{ \int_\Omega |f(y)|^2 dy \right\}$$
$$\leq \left\{ \int_\Omega |K(x,y)|^2 dy \right\} \cdot \|f\|^2$$

por tanto

$$\|Af\|^2 = \int_\Omega |Af(x)|^2 dx \leq M^2 \|f\|^2 < \infty \quad , \quad \|Af\| \leq M\|f\| < \infty \, ,$$

para cada $f(x) \in L2(\Omega)$.

Ejemplo 4. Operadores diferenciales ordinarios de segundo orden.

El operador $T: L2(-n,n) \circlearrowleft$ lo definimos como

$$D(T) = \{ f \in L_2(-n,n) \mid f''(x) \text{ es continua en } [-n,n] \} \; ; \; Tf = -\frac{d^2 f}{dx^2} + q(x) f \, ,$$

donde $q(x)$ es continua y real-valuada en $[-n,n]$.

Recordemos que la solución general de la ecuación en $u(x)$

$$T u(x) = f(x) \quad , \quad para \quad f \in L_2(-n,n)$$

está dada por

$$u(x) = c_1 u_1(x) + c_2 u_2(x) + u_1(x) \int_{-n}^{x} \frac{u_2(y) f(y)}{W(u_1,u_2)} dy - u_2(x) \int_{-n}^{x} \frac{u_1(y) f(y)}{W(u_1,u_2)} dy$$

donde c_1, c_2 son complejos arbitrarios; u_1, u_2 son soluciones linealmente independientes de la ecuación homogenea $Tu=0$ y $W(u_1,u_2)$ es el Wronskiano.

Es inmediato que T no es inyectivo ya que $Tu=0$ tiene soluciones no triviales. Ahora estudiaremos dos restricciones del operador T.

a) El operador $T_0: L2(-n,n) \circlearrowleft$ asociado al problema de valores iniciales es

$$D(T_0) = \{ f \in D(T) \mid f(-n) = f'(-n) = 0 \} \quad , \quad T_0 f = Tf \quad ;$$

es claro que T_0 es densamente definido. Este operador es inyectivo ya que la única solución al problema de valores iniciales

$$T_0 u(x) = 0 \quad , \quad u(-n) = u'(-n) = 0$$

es la trivial $u(x)=0$, por tanto T_0^{-1} está bien definido y es el operador integral

$$T_0^{-1} f(x) = \int_{-n}^{x} G(x,y) f(y) dy \quad , \quad G(x,y) = W(u_1,u_2)^{-1} [u_1(x) u_2(y) - u_2(x) u_1(y)]$$

donde u_1, u_2 son soluciones linealmente independientes de $Tu=0$.

b) El operador $T_1: L2(-n,n) \circlearrowleft$ asociado el problema de valores en la frontera es

$$D(T_1) = \{ f \in D(T) \mid f(-n) = f(n) = 0 \} \quad , \quad T_1 f = Tf \quad ,$$

es densamente definido e inyectivo ya que la única solución de la ecuación con condiciones de frontera

$$T_1 u(x) = 0 \quad , \quad u(-n) = u(n) = 0$$

es la trivial $u=0$, por tanto T_1^{-1} está bien definido y es el operador integral

$$T_1^{-1} f(x) = \int_{-n}^{n} G(x,y) f(y) dy \, ,$$

cuyo kernel es la función de Green

$$G(x,y) = \begin{cases} W(u_1,u_2)^{-1} \; u_1(x) u_2(y) & -n \leq x \leq y \\ W(u_1,u_2)^{-1} \; u_2(x) u_1(y) & y < x \leq n \end{cases} ;$$

donde $u_1(x)$ y $u_2(x)$ son soluciones de $Tu=0$ linealmente independientes que satisfacen las condiciones de frontera en $-n$ y n respectivamente.

Ejemplo 5. Operador maximal de multiplicación.

Sea $q:R^m \to R$ una función localmente cuadrado integrable :

$$N_q(x) = \left\{ \int_{|x-y|\leq 1} |q(y)|^2 dy \right\}^{1/2} < \infty \quad \text{para cada } x \in R^m .$$

El operador maximal de multiplicación por $q(x)$ en $L2(\Omega)$ se define como

$$D(Q) = \{ f \in L_2(\Omega) \mid q(x)f(x) \in L_2(\Omega) \} \; ; \quad Qf = q(x) f \; ;$$

y es densamente definido ya que $C_0^\infty(\Omega)$ siempre está contenido en el dominio $D(Q)$. Este operador es muy importante básicamente por dos razones, la primera es que cada potencial $q(x)$ en la ecuación

$$(-\Delta + q)u = \lambda u$$

siempre puede verse como un operador maximal de multiplicación y como tal tiene propiedades que permiten caracterizar al operador de Schröedinger; la segunda es que todos los operadores diferenciales con coeficientes constantes en $L2(R^m)$ pueden transformarse en operadores maximales de multiplicación usando la transformada de Fourier de manera que las propiedades de operadores diferenciales y las de operadores maximales de multiplicación por polinomios son exactamente las mismas .

Ahora definimos la suma entre operadores y la multiplicación por escalares (que serán números complejos) con las cuales el conjunto de operadores lineales es un espacio vectorial.

Def. La suma de los operadores $T,S:H_1 \to H_2$ es el operador

$$D(T+S) = D(T) \cap D(S) \quad , \quad (T+S)f = Tf + Sf$$

el operador λT con λ escalar es

$$D(\lambda T) = D(T) \qquad , \quad (\lambda T) f = \lambda T f .$$

Una de las operaciones entre operadores que no puede darse en espacios vectoriales arbitrarios (como R^m) es la multiplicación, la cual tiene importantes aplicaciones en toda la teoría de operadores lineales como el poder usar la teoría de funciones de variable compleja.

Def. El producto de los operadores $S:H_1 \to H_2$ y $T:H_2 \to H_3$ se define como la composición de funciones, y es el operador

$$D(TS) = \{ f \in D(S) \mid Sf \in D(T) \} \; , \quad (TS) f = T \circ S f .$$

2. Operadores acotados y el espacio de Banach $B(H_1, H_2)$

El ejemplo clásico de operador acotado es una matriz que actua entre dos espacios R^m y R^n , en espacios de dimensión infinita los operadores acotados son la generalización inmediata del concepto de matriz pero pueden tener propiedades que no tienen las matrices finitas, como poseer un espectro continuo mientras que toda matriz finita sólo tiene un espectro discreto.

Def. Un operador lineal $T:H_1 \to H_2$ se llama continuo si para cada $\varepsilon>0$ existe una $\delta>0$ tal que

$$\|f-g\|<\delta \quad \text{implica} \quad \|Tf-Tg\|=\|T(f-g)\|<\varepsilon.$$

Def. Un operador $T:H_1 \to H_2$ se llama acotado si existe una $C\geq 0$ tal que

$$\|Tf\| \leq C\|f\| \quad \text{para cada } f\in D(T).$$

Como en el caso de funcionales (I-$3.1), los conceptos de continuidad y acotación de un operador son equivalentes, por otro lado la acotación de un operador es más fácil de verificar y manipular algebraicamente.

Teorema. Un operador $T:H_1 \to H_2$ es continuo en su dominio si y sólo si es acotado en su dominio.

La acotación de un operador permite definir una norma en el espacio de operadores acotados de H_1 en H_2, que denominaremos $B(H_1,H_2)$ y en el caso $H_1=H_2$ usamos $B(H)$.

Def. La norma de un operador acotado T se define como

$$\|T\| = \sup_{f\neq 0} \|Tf\|/\|f\| \quad \text{para } f\in D(T).$$

Es inmediato que si $T\in B(H_1,H_2)$ y $S\in B(H_2,H_3)$ entonces

$$\|TS\| \leq \|T\|\cdot\|S\|.$$

La importancia de la norma de operadores es que el espacio $B(H_1,H_2)$ es un espacio vectorial Completo con la métrica inducida por la norma de operadores, lo que hace de $B(H_1,H_2)$ un espacio de Banach, y esta propiedad de completes la usaremos para definir operaciones como derivada o integral de un operador respecto a un parámetro.

Teorema (1.1). El espacio $B(H_1,H_2)$ es un espacio de Banach.

Los operadores densamente definidos y acotados $T\in B(H_1,H_2)$ tienen una única extension al espacio H_1, por lo que al referirnos a un operador acotado y densamente definido estaremos pensando en tal extensión que denotamos por $\overline{T}$.

Teorema (1.2). Si $T\in B(H_1,H_2)$ es densamente definido y acotado Entonces existe una única extensión $\overline{T}\supset T$ tal que

i) $\|\overline{T}\| = \|T\|$ y

ii) $D(\overline{T})=H_1\supset D(T)$.

Potencia T^n de un operador. Para un operador $T\in B(H)$ la potencia T^n se define como

$$T^n = T_{(1)}\,T_{(2)}\cdots\cdots T_{(n)} \quad ;$$

por la acotación de T el rango de cada T^k siempre está en el dominio $D(T)=H$ por tanto el operador T^n está bien definido; de la definición norma de operadores es inmediata la desigualdad

$$\|T^n\| \leq \|T\|^n.$$

Ejemplo 6. Cada matriz $A:R^m \dashrightarrow R^n$ es un operador acotado.

Si $f=Ag$ tenemos

$$f_i=\sum_{j=1}^m a_{ij}\, g_j \quad ; \quad 1\le i\le n \quad \text{y} \quad A=\{a_{ij}\} \; ;$$

$$|f_i| \le \sum_{j=1}^m |a_{ij}|\cdot|g_j| \le \{\sum_{j=1}^m |a_{ij}|^2\}^{1/2} \; \{\sum_{j=1}^m |g_j|^2\}^{1/2} \quad \text{(por Schwartz)};$$

$$\|Ag\|^2=\|f\|^2=\sum_{i=1}^n |f_i|^2 \le \{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m |a_{ij}|^2\} \; \|g\|^2 \quad \text{implica}$$

$$\|A\| \le \{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m |a_{ij}|^2\}^{1/2} .$$

Ejemplo 1 (continuación).
a) El operador T_0 no es acotado. Supongamos que T_0 es acotado entonces tiene una única extension acotada $\bar{T}_0$ cuyo dominio es todo $L2(-n,n)$, en particular tenemos

$$<\bar{T}_0 x^k | \varphi> = -<x^k | T_0 \varphi> = -<x^k | \tfrac{d}{dx}\varphi> \quad \text{para cada } \varphi\in C_0^\infty(-n,n)$$

lo que indica que $\bar{T}_0 x^k$ es la derivada distribucional de x^k y como esta función es analítica dicha derivada distribucional coincide con la derivada clásica

$$\bar{T}_0 x^k = k\, x^{k-1} \quad , \quad k\in \mathbb{N}$$

ya que $\bar{T}_0$ es acotado tenemos

$$\|\bar{T}_0 x^k\| = k\,\|x^{k-1}\| \le \|\bar{T}_0\|\cdot\|x^k\| \quad \rightarrow$$

$$k\, \frac{n^{2k-1}}{2k-1} \le \|\bar{T}_0\| \, \frac{n^{2k+1}}{2k+1}$$

$$k\left(\frac{2k+1}{2k-1}\right) \le n^2 \; \|\bar{T}_0\|$$

lo cual es absurdo ya que $n^2\|\bar{T}_0\|$ está acotado y el lado izquierdo de la última desigualdad es tan grande como se desee tomando k suficientemente grande, por tanto T_0 no es acotado.

b) El operador T_1 es acotado. Como la norma de $(W_1^0(-n,n),<.,.>_1)$ es

$$\|f\|_1 = \{\|f\|^2 + \|\tfrac{df}{dx}\|^2\}^{1/2}$$

entonces

$$\|T_1 f\| = \|\tfrac{d}{dx} f\| \le \|f\|_1 \qquad \text{para cada } f\in C_0^\infty(-n,n),$$

por tanto T_1 es acotado y tiene una extensión única $\bar{T}_1$,con $D(\bar{T}_1)=W_1^0(-n,n)$, que es precisamente la derivada distribucional.

c) Es claro que T no es acotado por ser extensión del operador T_0 que no es acotado.

Ejemplo 2 (continuación). El operador segunda derivada es la composición del operador derivada con si misma y según el ejemplo anterior no es acotado por tanto el operador minimal $\mathbb{H}_n^0$ y su extensión de Friedrichs $\mathbb{H}_n^1$ no son acotados.

Ejemplo 3 (continuación). El operador integral es acotado ya que probamos satisface

$$\|Af\| \le M\|f\| \qquad \text{para cada } f\in L_2(\Omega)$$

por tanto

$$\|A\| \le \{\int_\Omega dx \int_\Omega dy \, |K(x,y)|^2\}^{1/2} < \infty .$$

Ejemplo 4 (continuación). Nuevamente, los operadores T, T_0 y T_1

no son acotados pero las inversas T_0^{-1} y T_1^{-1} sí son acotados debido a que la función de Green en cada caso satisface

$$\int_{-n}^{n} dx \int_{-n}^{n} dy\ |G(x,y)|^2 < \infty .$$

Como los operadores T_0^{-1} y T_1^{-1} son densamente definidos y acotados tienen una única extensión $\overline{T_0^{-1}}$ y $\overline{T_1^{-1}}$ respectivamente las cuales son inyectivas y por tanto sus inversas $(\overline{T_0^{-1}})^{-1}$ y $(\overline{T_1^{-1}})^{-1}$ son extensiones de los operadores T_0 y T_1 .

Ejemplo 5 (continuación). Como en el caso de la derivada, el operador maximal de multiplicación es acotado o no dependiendo de los espacios en que actue.

a) si $|q(x)|$ es acotada por M sobre $\Omega \subseteq R$ entonces el operador

$$Q : L_2(\Omega) \circlearrowleft \quad , \quad Qf = qf$$

es acotado ya que

$$\|Qf\|^2 = \int_\Omega |qf|^2 dx \leq M^2 \|f\|^2 \ ;$$

por tanto $\|Q\| \leq M$.

b) el operador maximal de multilpicación por x^K

$$Q_K : L_2(R) \circlearrowleft \quad , \quad Q_K f = x^K f$$

no es acotado ya que

$$n \leq |x|^{2K} \qquad para \quad |x| \geq n^{1/2K} \quad , \ n = 1, 2, \ldots$$

y para cada $f_n \in L2(R)$ que se anula en $[-n^{1/2K}, n^{1/2K}]$ tenemos

$$\|x^K f_n\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |x|^{2K}\ |f_n|^2 dx \geq 2n\ \|f_n\|^2 \ ;$$

si Q_K es acotado entonces

$$\|Q_K\|\ \|f_n\| \geq \|Q_K f_n\| \geq \sqrt{2n}\ \|f\| \quad \text{implica} \quad \|Q_K\| \geq \sqrt{2n}$$

y como n es arbitrario se llega a un absurdo. Este resultado era de esperarse ya que x^K es la transformada de Fourier de la k-ésima derivada (que no es un operador acotado sobre L2(R)).

3. Series infintas y funciones de operadores

Como espacio métrico completo, en el espacio B(H) podemos definir el concepto de convergencia de una sucesión de operadores $\{T_K\}$ al operador T.B(H) como

$$\lim \|T_K - T\| = 0 \ ;$$

donde $\|\cdot\|$ es la norma de operadores.

Una suma finita de operadores acotados es un operador acotado, pero una suma infita no siempre define un operador acotado, para garantizar que la serie

$$\sum_{K=0}^{\infty} T_K \qquad , \qquad T_K \in B(H)$$

define un operador acotado es suficiente que tal serie sea absolutamente convergente; es decir, que la serie númerica

$$\sum_{K=0}^{\infty} \|T_K\| < \infty$$

converja, ya que en tal caso la sucesión de sumas parciales

$$S_m = \sum_{K=0}^{m} T_K \qquad ; \qquad \|S_m - S_n\| \leq \sum_{K=n+1}^{m} \|T_K\| \longrightarrow 0$$

es una sucesión de Cauchy y por completes de B(H) converge a un elemento de B(H).

Ejemplo. La exponencial de un operador $T \in B(H)$ se define como

$$e^T = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{T^k}{k!}$$

y tal serie siempre converge a un operador en B(H) ya que la serie numérica de $e^{\|T\|}$ es convergente para cada $\|T\| < \infty$:

$$\|e^T\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\|T\|^k}{k!} = e^{\|T\|}.$$

Ejemplo. La serie de Nuemann

$$(1-T)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} T^k \quad ; \quad \|(1-T)^{-1}\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \|T\|^k = \frac{1}{1-\|T\|}$$

es convergente si $\|T\| < 1$.

Ejemplo. La serie del binomio con $p \in R$

$$(1+T)^p = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{p}{k} T^k$$

es convergente para $\|T\| < 1$ y permite darle sentido a expresiones como $(1+T)^p$. Hay una generalización de este resultado en el caso de operadores autoadjuntos que da el Teorema Espectral para operadores autoadjuntos.

Los ejemplos anteriores son ejemplos de funciones cuya variable es un operador y la imagen correspondiente es un operador; pueden definirse muchas otras funciones mediante series de potencias.

4. Funciones operador-valuadas

Def. Una función operador valuada se define como

$$T_z : \mathbb{C} \longrightarrow B(H) : z \longrightarrow T(z) \in B(H).$$

Ya que $\mathbb{C}$ y B(H) son espacios métricos, definimos el concepto de función operador-valuada continua de la manera usual: $F:\mathbb{C} \dashrightarrow B(H)$ es continua en el punto $z_0 \in \mathbb{C}$ si para cada $\varepsilon > 0$ existe una $\delta > 0$ tal que

$$|z - z_0| < \delta \quad \text{implica} \quad \|F(z) - F(z_0)\| < \varepsilon \ ;$$

con este concepto de continuidad el límite una función T(z) operador-valuada que es continua

$$\lim_{z \to z_0} T(z) = T(z_0)$$

se entiende como el operador T acotado al cual convergen la sucesión $\{T(z_n)\} \subset B(H)$

$$\lim \|T(z_0) - T(z_n)\| = 0$$

cuando $\{z_n\} \dashrightarrow z$.

Los conceptos de continuidad y límite permiten hablar de la derivada e integral de una función operador-valuada.

Def. La derivada de la función T(z) es el límite (cuando existe)

$$\frac{d}{dz} T(z) = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{1}{\Delta z} \left\{ T(z + \Delta z) - T(z) \right\}.$$

Def. La integral de T(z) se define por sumas de Riemann como

$$\int_\Gamma T(z)\,dz = \lim_{\|\Delta\|\to 0} \sum_{i=1}^{N} T(z_i)\,\Delta z_i \quad , \quad \Gamma \subset \mathbb{C} \; ;$$

cuando las sumas parciales convergen.

Algunas propiedades elementales son

$$\frac{d}{dz} T(z)\,S(z) = \frac{dT}{dz}\cdot S + T\,\frac{dS}{dz} \quad ,$$

$$\frac{d\,T(z) f}{dz} = \frac{dT}{dz} f \quad ,$$

$$\int_\Gamma T(z) f\,dz = \int_\Gamma T(z)\,dz \cdot f \, .$$

5. Funciones operador-valuadas analíticas

Es bien conocido en teoría de variable compleja que los conceptos de serie de potencias absolutamente convergente y funciones derivables son equivalentes, esto mismo se cumple para funciones operador-valuadas .

Def. Una función $T(z):G\to B(H)$ (G es un abierto del plano complejo) se llama analítica en $z_0 \in G$ si existe una $r>0$ y una secuencia $\{T_k\}$ en $B(H)$ tal que la serie

$$T(z) = \sum_{k=0}^{\infty} (z-z_0)^k\, T_k$$

es absolutamente convergente en la norma de $B(H)$ para cada $z \in G$ que satisfaga $|z-z_0| < r$, r es el radio de convergencia de la serie.

Apartir de la definición anterior es fácil probar que todos los resultados importantes de la teoría de funciones analíticas siguen siendo válidos, como el Teorema de Cauchy, las fórmulas integrales de Cauchy, el Teorema (serie) de Laurent y el Teorema de Liouville.

Ejemplos importantes de funciones analiticas son

1) $$e^{zT} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k T^k}{k!}$$

2) la función resolvete $R(z)$ para $T \in B(H)$ es

$$R(z) = (z-T)^{-1} = z^{-1}(1-T/z)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} z^{-k-1}\, T^k ,$$

la serie converge si $\|T\| < |z|$, en tal caso

$$\|R(z)\| \leq \frac{1}{|z|-\|T\|} .$$

Nota. Es importante tener presente que un operador T debe ser acotado para que pueda tener sentido cuaquier serie de potencias de T, en el caso de operadores NO acotados tales series no están definidas en general, nuevamente el Teorema Espectral para operadores autoadjuntos permite dar un significado preciso a expresiones como

$$e^{zT} \quad y \quad \int T(z)\,dz$$

cuando T no es acotado.

6. Teorema de Banach-Steinhaus. Convergencia débil y fuerte de operadores.

El concepto de convergencia de sucesiones de operadores $\{T_k\}$ "más fuerte" lo constituye la convergencia en la NORMA de operadores, puede probarse que si dos operadores están muy cercanos en el sentido de la norma de operadores entonces sus propiedades también son muy parecidas. Los siguientes conceptos de convergencia son importantes en aplicaciones en particular la convergencia fuerte de operadores que usaremos en el capítulo V.

Def. La sucesion $\{T_k\} \subset B(H_1,H_2)$ se llama FUERTEMENTE CONVERGENTE al operador $T \in B(H_1,H_2)$ si cumple

$$\lim \|T_k f - Tf\|_{H_2} = 0 \quad \text{para cada } f \in H_1;$$

nótese que usamos la norma de H_2, no la de operadores.

Def. La sucesión $\{T_k\} \subset B(H_1,H_2)$ es DÉBILMENTE CONVERGENTE a $T \in B(H_1,H_2)$ si cumple

$$\lim \langle T_k f | g \rangle = \langle Tf | g \rangle \quad \text{para } f \in H_1 \text{ y } g \in H_2.$$

Como es de esperarse convergencia en norma implica convergencia fuerte y esta a su vez implica convergencia débil, pero las implicaciones contrarias son falsas en general.

El siguiente teorema es importante en toda la teoría de operadores lineales.

Teorema (Banach-Steinhaus). Si para cada $f \in H_1$ existe una constante $C(f)$ tal que la sucesión de operadores $\{T_k\} \subset B(H_1,H_2)$ cumple

$$\|T_k f\| \leq C(f)$$

(nótese que no se pide convergencia en algún sentido) Entonces existe una constante C que no depende de alguna $f \in H$ en particular que acota a toda la sucesión $\{T_k\}$; es decir,

$$\|T_k\| \leq C$$

la sucesión $\{T_k\}$ está acotada en la norma de operadores.

----
§2. Isomorfismos entre espacios de Hilbert
----

1. Isometrías e isomorfismos

El concepto de operador permite definir de una manera precisa que tan parecidos son dos espacios de Hilbert.

Def. Un operador $U: H_1 \to H_2$ se llama isometría si cumple

$$D(U) = H_1, \quad \|Uf\| = \|f\| \quad \text{para cada } f \in H_1;$$

es decir, es acotado y preserva la norma.

Def. Una isometría es llamada ISOMORFISMO si $\text{Rango}(U) = H_2$, y cuando existe un isomorfismo entre los espacios H_1 y H_2 estos se llaman isomorfos.

Teorema (2.1). Si los pre-espacios de Hilbert H_1 y H_2 son isomorfos tenemos

i) H_1 es espacio de Hilbert si y sólo si H_2 lo es

ii) Un espacio de Hilbert es separable si y sólo si es isomorfo a ℓ_2.

2. La Transformada de Fourier sobre $L2(R^m)$

La transformada de Fourier $F_0 : L2(R^m) \circlearrowleft$ se define como el operador

$$D(F_0) = C_0^\infty(R^m) \quad , \quad F_0 f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{m/2}} \int_{R^m} e^{-ixy} f(y)\, dy \;;$$

tiene propiedades importantes como operador de $B(L2(R^m))$ que son fáciles de probar.

Teorema (2.2). El operador F_0 tiene las propiedades siguientes

i) es una isometría de $L2(R^m)$ en sí mismo

$$\|F_0 f\| = \|f\| \quad y \quad \|F_0^{-1} f\| = \|f\| \quad \text{para cada } f \in D(F_0)$$

que es la conocida identidad de Parseval

ii) F_0 es densamente definido por tanto F_0 y F_0^{-1} tienen extensiones únicas que llamamos $F, F^{-1} \in B(L2(R^m))$

iii) si $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_m)$ es un multi-índice ($\alpha_j \geq 0$), definimos

$$x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \ldots x_m^{\alpha_m} \quad ; \quad |\alpha| = \Sigma_{j=1}^m \alpha_j \;;$$

$$D^\alpha = \Pi_{j=1}^m \left(+ \frac{\partial}{\partial x_j} \right)^{\alpha_j}$$

Entonces

$$D^\alpha F f = (-i)^{|\alpha|} F x^\alpha f \qquad \text{para } f \in L_2(R^m) \text{ tal que } Ff \in W_{|\alpha|}(R^m)$$

$$x^\alpha F f = F D^\alpha f \qquad \text{para } f \in W_{|\alpha|}(R^m) \;,$$

donde las derivadas son distribucionales.

3. Los espacios $L2(R^m)$ y $W_r(R^m)$ son isomorfos

El conjunto

$$L_{2,r}(R^m) = \left\{ f \in L_2(R^m) \;\middle|\; (1+|x|^2)^{r/2} f \in L_2(R^m) \right\}$$

es un subespacio de $L2(R^m)$, pero si en él introducimos el producto interior

$$\langle f | g \rangle_{(r)} = \int f^* g\, (1+|x|^2)^r dx = \langle (1+|x|^2)^{r/2} f \,|\, (1+|x|^2)^{r/2} g \rangle$$

con $\|\cdot\|_{(r)}$ como la norma respectiva, entonces $(L2_r(R^m), \langle .,. \rangle_{(r)})$ es un espacio de Hilbert ISOMORFO a $L2(R^m)$ ya que

$$U_r : (L_{2,r}(R^m), \langle \cdot | \cdot \rangle_{(r)}) \longrightarrow (L_2(R^m), \langle \cdot | \cdot \rangle) : f \longrightarrow U_r f = (1+|x|^2)^{r/2} f$$

define una isometría :

$$\langle f | g \rangle_{(r)} = \langle U_r f | U g \rangle \quad \text{implica} \quad \|f\|_{(r)} = \|U_r f\|.$$

Ahora probaremos que $FL2_r(R^m) = W_r(R\ )$ de lo cual se desprende que $(W\ \ {}^m), \langle .,. \rangle_r)$ y $(L2(R^m), \langle .,. \rangle)$ son espacios de Hilbert isomor

Def. Decimos que dos normas $\|\cdot\|_\alpha$ y $\|\cdot\|_\beta$ en un espacio de Hilbert H son equivalentes si existen constantes positivas C_α, C_β tales que

$$\|f\|_\alpha \le C_\alpha \|f\|_\beta \quad \text{y} \quad \|f\|_\beta \le C_\beta \|f\|_\alpha \quad \text{para cada } f \in H.$$

Es claro que podemos usar cualquiera de las dos normas para estudiar la estructura de espacio métrico que posee H.

Proposición. Las normas siguientes son equivalentes en $W_r(R^m)$

$$\|f\|_r = \{ \textstyle\sum_{|\alpha|\le r} \|D^\alpha f\|^2 \}^{1/2} \quad ,$$
$$\|f\|_{r,0} = \|(1+|x|^2)^{r/2} F f\| \quad ,$$
$$\|f\|_{r,1} = \{ \|f\|^2 + \textstyle\sum_{|\alpha|=r} \|D^\alpha f\| \}^{1/2} .$$

Demostración. Como la transformada de Fourier satisface

$$\|Ff\| = \|f\| \quad \text{y} \quad \|x^\alpha F f\| = \|D^\alpha f\|$$

las normas citadas las transformamos en polinomios

$$\|f\|_r^2 = \int |Ff|^2 \textstyle\sum_{|\alpha|\le r} |x|^{2\alpha} dx$$
$$\|f\|_{r,0}^2 = \int |Ff|^2 \; (1+|x|^2)^r \; dx$$
$$\|f\|_{r,1}^2 = \int |Ff|^2 (1 + \textstyle\sum_{|\alpha|=r} |x|^{2\alpha}) dx$$

por tanto basta comparar los polinomios

$$\textstyle\sum_{|\alpha|\le r} |x|^{2\alpha} \quad , (1+|x|^2)^r \quad \text{y} \quad (1+\textstyle\sum_{|\alpha|=r} |x|^{2r}) \; ;$$

pero como tienen el mismo grado (r) entonces existen constantes C_1 , C_2 y C_3 que sólo dependen de m (R^m) y r tales que

$$1 + \textstyle\sum_{|\alpha|=r} |x|^{2\alpha} \le C_1^2 (1+|x|^2)^r \le C_2^2 \textstyle\sum_{|\alpha|\le r} |x|^{2\alpha} \le C_3^2 (1+\textstyle\sum_{|\alpha|=r} |x|^{2\alpha})$$

por tanto

$$\|f\|_{r,1} \le C_1 \|f\|_{r,0} \le C_2 \|f\|_r \le C_3 \|f\|_{r,1} . \qquad \text{QED.}$$

Corolario. Los espacios $(L2_r(R^m), <.,.>_{(r)})$ y $(W_r(R^m), <.,.>_r)$ son isomorfos.

Demostración. La prueba es inmediata si observamos que

$$\langle F^{-1}f | F^{-1} g \rangle_{r,0} = \langle f | g \rangle_{(r)} \quad \text{para } f, g \in L_{2,r}(R^m)$$

define un producto interior cuya norma $\|.\|_{r,0}$ es equivalente a la norma $\|\cdot\|_r$ por tanto $(FL2_r(R^m), <.,.>_{r,0})$ y $(W_r(R^m), <.,.>_r)$ son el mismo espacio entonces

$$F^{-1} L_{2,r} (R^m) = W_r(R^m).$$

Corolario. $(W_r(R^m), <.,.>_r)$ es isomorfo a $(L2(R^m), <.,.>)$.

Nota. Hemos probado que podemos usar cualquiera de la normas

$$\|f\|_r = \{ \textstyle\sum_{|\alpha|\le r} \|D^\alpha f\|^2 \}^{1/2} \quad ,$$
$$\|f\|_{r,0} = \|(1+|x|^2)^{r/2} F f\| \quad ,$$
$$\|f\|_{r,1} = \{ \|f\|^2 + \textstyle\sum_{|\alpha|=r} \|D^\alpha f\|^2 \}^{1/2}$$

para trabajar en el espacio de Sobolev $W_r(R^m)$, lo que es particularmente útil para mostrar que $(W_r(R^m), <.,.>_r)$ es la gráfica de cada operador deferencial de orden (r) con coeficientes constantes.

$3. El operador Adjunto

---

1. Definición

El operador adjunto es el primer ejemplo de un operador definido via una forma sesquilineal : el producto interior.

Def. Sea T:H-->H un operador lineal densamente definido. El dominio del operador adjunto T^* se define como

$$D(T^*) = \{ g \in H \mid \text{existe un } h_g \in H \text{ tal que } \langle h_g | f\rangle = \langle g | Tf \rangle \text{ para cada } f \in D(T) \}$$

por lo cual satisface

$$T^* g \equiv h_g \quad y \quad \langle T^* g | f \rangle = \langle g | Tf \rangle \text{ para cada } f \in D(T) \text{ y } g \in D(T^*).$$

Nota. La hipótesis de que T sea densamente definido garantiza que T^* es un operador (no es un mapeo multivaluado), además T^* es un operador lineal.

Nota. La definición de operador autodjunto es aplicable tanto a operadores acotados como no acotados.

Si T es un operador acotado el teorema siguiente da una caracterización del adjunto T .

Teorema. Asumamos que T es densamente definido . Entonces T^*es acotado si y sólo si T es acotado , en tal caso $\|T\| = \|T^*\|$.

2. Operadores simétricos y autoadjuntos.

La categoría de operadores simétricos y autoadjuntos es importante ya que muchos de los operadores de la Física están detro de esta categoría, y para estos operadores hay una extensa teoría parte de la cual estudiaremos en este trabajo con la finalidad de conocer las propiedades relevantes que permitan conocer formalmente a operadores de Schröedinger y poder resolver el problema de autovalores y autofunciones.

Def. Un operador T:H-->H densamente definido se llama simétrico si satisface $\langle Tf | g \rangle = \langle f | Tg \rangle$ para $f, g \in D(T)$.

Proposición. Si T es simétrico entonces $T \subset T^*$.

Def. Un operador T simétrico se llama autoadjunto si $T=T^*$.

Nota. Las definciones son válidas tanto para operadores acotados como no acotados, y debe tenerse presente que simétrico y autoadjunto son conceptos muy diferentes en general (amenos que T sea acotado como veremos enseguida) algo que en los textos ordinarios de Física no distinguen. Los operadores diferenciales de la Mecánica Cuántica son simétricos sobre $L2(R^n)$, no acotados y en su gran mayoria tienen una única extensión autoadjunta.

Teorema (3.1). Si T es acotado y simétrico entonces $\bar{T}$ es autoadjunto.

La prueba es inmediata ya que por ser T densamente definido y acotado la única extension que tiene es $\bar{T}$, que es simétrico, entonces de $\bar{T} \subset T^*$ y $T^* \subset \bar{T}$ se concluye $\bar{T}^* = \bar{T}$.

El siguiente teorema es importante en teoría espectral, ya que da la prueba de que la resolvente de un operador autoadjunto siempre es un operador autoadjunto.

Teorema (3.2). Si T es autoadjunto y T^{-1} existe entonces T^{-1} es autoadjunto.

Ejemplo 6 (continuación). El adjunto A^* de la matriz $A:R^m \to R^m$ es acotado :

a) por definición

$$\langle f | A g \rangle = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m f_i^* a_{ij} g_j = \sum_{j=1}^m \Big(\sum_{i=1}^m a_{ij}^* f_i \Big)^* g_j = \langle A^* f | g \rangle$$

por tanto $A^* =$ transpuesta conjugada de la matriz A ;

b) si $a_{ij}^* = a_{ji}$ entonces $A = A^*$ y la matriz A es simétrica (autoadjunta): en espacios de dimensión finita los conceptos de simétrico y autoadjunto son equivalentes, cosa que no ocurre en espacios de dimensión infinita en general.

Ejemplo 2 (continuación).

a) El operador minimal $\mathbb{H}_n^0$ es simétrico (no acotado) ya que

$$\langle \mathbb{H}_n^0 f | g \rangle = \langle -\tfrac{d^2}{dx^2} f | g \rangle + \langle q f | g \rangle \quad \text{para } f, g \in C_0^\infty(-n,n)$$

e integrando por partes queda

$$\langle \mathbb{H}_n^0 f | g \rangle = \langle f | \mathbb{H}_n^0 g \rangle$$

b) la extensión de Friedrichs $\mathbb{H}_n^1$ de $\mathbb{H}_n^0$ es simétrico

$$\langle -\Delta f + q f | g \rangle = -\sum_{i=1}^m \int_{\partial B_n} \frac{\partial f^*}{\partial x_i} g\, n_i \, dS + \langle \nabla f | \nabla g \rangle + \langle f | q g \rangle = \langle f | -\Delta g + q g \rangle$$

donde usamos la fórmula de Green (integración por partes) la cual es válida para derivadas distribucionales, y para $f, g \in W_1^0(B_n)$ tenemos

$$f(\partial B_n) = g(\partial B_n) = 0 \qquad \text{en el sentido de trazas},$$

de lo cual se obtine la simetría de $\mathbb{H}_n^1$. En el capítulo siguiente mostraremos que $\mathbb{H}_n^1$ es autoadjunto sobre $L2(B_n)$.

Ejemplo 3 (continuación).

a) El adjunto A^* del operador integral se obtiene de

$$\langle f | A g \rangle = \int_\Omega dx\, f(x)^* \int_\Omega dy\, K(x,y)\, g(y) = \int_\Omega dy \Big[\int_\Omega dx\, f(x)\, K(x,y)^* \Big]^* g(y)$$

por tanto

$$A^* f(x) = \int_\Omega K(y,x)^* f(y)\, dy \;,$$

es decir, A^* es un operador integral cuyo kernel se obtiene conjugando el kernel $K(x,y)$ de A y permutando la variable de integración (y) con la con la variable (x); es claro que

$$\| A^* \| \le \Big\{ \int_\Omega dx \int_\Omega dy\, |K(x,y)|^2 \Big\}^{1/2} ,$$

además $\|A\| = \|A^*\|$ como era de esperarse.

b) si $K(x,y)^* = K(y,x)$ entonces $A=A^*$ (A es autoadjunto) .

Ejemplo 4 (continuación).
a) T_0 no es simétrico

$$\int_{-h}^{h} -\frac{d^2 f^*}{dx^2}\, g\, dx = -\frac{df^*}{dx}\, g\Big|_{-h}^{h} + \int_{-h}^{h} \frac{df^*}{dx}\frac{dg}{dx}\, dx \;,$$

$$\text{donde } \; -\frac{d}{dx} f^* \cdot g\Big|_{-h}^{h} \neq 0 \quad \text{en general}$$

por tanto $\langle T_0 f, g\rangle \neq \langle f, T_0 g\rangle$ en general para $f,g \in D(T_0)$.

b) T_1 es simétrico, basta con integrar por partes. La inversa T_1^{-1} es un operador simétrico ya que la función de Green es un kernel simétrico.

Ejemplo 5 (continuación).
a) El adjunto del operador maximal de multiplicación por $q(x)$ es inducido por $q(x)^*$:

$$\langle qf \mid g\rangle = \langle f \mid q^* g\rangle \quad , \quad D(Q^*) = D(Q)$$

b) si $q(x)$ es real valuada entonces Q es autoadjunto, ya que coincide con su adjuto.

----
§4. Proyecciones Ortogonales

El concepto de operador de proyección es fundamental en la teoría espectral de operadores autoajuntos y para nuestros propósitos permite justificar el cálculo de funciones propias de un operador de Schröediger en regiones acotadas através de la suma directa de operadores autoadjuntos.

El teorema de proyección afirma que dado un subespacio cerrado $M \subset H$, H admite la descomposición

$$H = M \oplus M^{\perp} \;;$$

es decir, cada $f \in H$ tiene una única descomposición de la forma

$$f = f_1 + f_2 \;, f_1 \in M \text{ y } f_2 \in M \;; \; \|f\|^2 = \|f_1\|^2 + \|f_2\|^2 \;;$$

lo que permite definir el operador de proyección ortogonal P_M

$$D(P_M) = H \;, \; P_M f = f_1 \;;$$

la defición de $P_{M^\perp}$ es análoga. La acotación de P_M y $P_{M^\perp}$ es inmediata

$$\|P_M f\| = \|f_1\| \leq \|f\| \quad ; \; 0 \leq \|P_M\| \leq 1 \;;$$

cada operador de proyección es autoadjunto $\langle P_M f, g\rangle = \langle f, P_M g\rangle$.

Proposición. Si M es un subespacio cerrado entonces P_M tiene las siguientes propiedades
 i) es acotado
 ii) es autoajunto.

Otra caracterización importante de una proyección ortogonal la da el concepto de operador idempotente.

Def. Un operador $P:H \dashrightarrow H$ se llama idempotente si cumple $P^2 = P$.

Teorema (4.1). Para un operador $P\in B(H)$ los enunciados siguientes son equivalentes

i) P es una proyección ortogonal
ii) I-P es una proyección ortogonal
iii) P es idempotente y $R(P)=N(P)$
iv) P es idempotente y autoadjunto ;

donde Rango(P)=Núcleo(I-P) y Núcleo(P)=Rango(I-P) .

Notación. Si T,S son operadores simétricos y acotados entonces $\langle Tf,f\rangle$ y $\langle Sf,f\rangle$ son reales para cada $f\in H$. Si se cumple

$$\langle Tf|f\rangle \geq \langle Sf|f\rangle \quad \text{para cada } f\in H$$

entonces decimos que $T\geq S$, en particular T se llama no negativo si $T\geq 0$.

Ejemplo 7. Si H es separable entonces posee una B.O.N. numerable que llamamos $\{\phi_K\}$, a cada ϕ la denotamos por $|\phi_K\rangle$ y el teorema de Riez nos dice que le corresponde un único funcional lineal acotado en H^* que denotamos por $\langle\phi_K|$.

La proyección sobre $L(\phi_K)$ tiene la forma

$$P^{(K)} f = \langle\phi_K|f\rangle\,\phi_K \equiv |\phi_K\rangle\langle\phi_K|\cdot|f\rangle.$$

Cada operador P_N dado por

$$P_N = \sum_{K=1}^{N} |\phi_K\rangle\langle\phi_K|$$

es un proyección ortogonal sobre H ya que
a) es idempotente

$$P_N^2 = \sum_{K=1}^{N}\sum_{m=1}^{N} |\phi_K\rangle\langle\phi_K|\phi_m\rangle\langle\phi_m| = \sum_{K=1}^{N} |\phi_K\rangle\langle\phi_K| = P_N$$

b) es autoadjunto por ser simétrico y acotado.

Proposición. La sucesión de proyecciones $\{P_N\}$ satisface

i) $P_N \leq P_{N+1}$

ii) $\{P_N\}$ converge fuertemente al operador identidad

$$\lim \|P_N f - 1 f\| = 0 \qquad \text{para cada } f\in H\ ;$$

la última afirmación se desprende de

$$f = \sum_{K=1}^{\infty} \langle\phi_K|f\rangle\,\phi_K = \lim \sum_{K=1}^{N} |\phi_K\rangle\langle\phi_K|\cdot f \quad ; \text{ implica}$$

$$\lim \left\| \sum_{K=1}^{N} |\phi_K\rangle\langle\phi_K| f - 1\cdot f\right\| = 0.$$

Finalmente daremos una relación muy estrecha entre la cercania de dos proyecciones en la norma de operadores y la dimensión de sus rangos respectivos, este resultado es importante para probar por ejemplo que operadores acotados cercanos en norma tienen subespacios invariantes con las mismas dimensiones.

Teorema (4.2). Si P y Q son proyecciones ortogonales que satisfacen

$$\|P-Q\| < 1$$

Entonces $\dim R(P) = \dim R(Q)$.

§5. Teoria Espectral de Operadores Autoadjuntos y Acotados

1. El problema de autovalores

Def. La resolvente de un operador $T:H\circlearrowleft$ se define como

$$R(z,T)=(z-T)^{-1}\in B(H)$$

cuando para $z\in\mathbb{C}$ dada tal operador existe y es acotado sobre H.

Def. El conjunto resolvente $\rho(T)$ se compone de todos los números complejos $z\in\mathbb{C}$ para los cuales la resolvente esta definida

$$\rho(T)=\{z\in\mathbb{C}\mid z-T \text{ es inyectivo}, (z-T)^{-1} \text{ es acotado y } \text{Rango}(z-T)=H\}.$$

Def. El espectro $\sigma(T)$ del operador T se define como el complemento del conjunto resolvente $\sigma(T)=\mathbb{C}\setminus\rho(T)$.

Def. Un punto λ del espectro $\sigma(T)$ se llama autovalor del operador T si existe una función $f\in D(T)$ con la cual se satisface

$$Tf=\lambda f$$

la dim Núcleo$(T-\lambda)$ se llama multiplicidad del autovalor λ y a la función f función propia.

Def. Al conjunto de autovalores de un operador le llamamos espectro puntual $\sigma_p(T)$.

Nota. El problema de autovalores $Tu=\lambda u$ sólo tiene sentido cuando T actua de un espacio de Hilbert H en sí mismo ya que si u es una función propia entonces Tu debe estar en el mismo espacio de u que es H. Por esto al estudiar la ecuación

$$Tf=\lambda f$$

debemos trabajar en el mismo espacio de Hilbert H,por ejemplo no es válido trabajar un operador de Schröedinger entre dos espacios distintos como $(W_1^0(\Omega),\langle .,.\rangle_1)$ y $L2(\Omega)$ aunque entre estos espacios el operador sea acotado.

Nota. Es común identificar al espectro con el conjunto de autovalores, pero deacuerdo a las definiciones dadas es necesario que exista una función EN EL DOMINIO DEL OPERADOR y que cumpla $Tf=\lambda f$ para que un punto del espectro sea autovalor. Puede haber elementos del espectro para los cuales exista una solución no trivial de $Tf=\lambda f$ pero no necesariamente están en el dominio del operador.

Ejemplo. Para el operador $T:L2(R)\circlearrowleft$ dado por

$$D(T)=W_2(R)\ ,\quad Tf=-\frac{d^2}{dx^2}f$$

las soluciones de la ecuación

$$Tu=\lambda u$$

son $e^{\pm i\sqrt{\lambda}x}$, por tanto si $\lambda\in[0,+\infty)$ la "funciones propias" no son cuadrado integrables y por tanto λ no es un autovalor; sin embargo, en el próximo capítulo probaremos que $[0,+\infty)$ es el espectro de T y carece de autovalores.

Nota. La diferencia entre operadores en R^n y operadores en espacios de dimensión infinita es que los primeros sólo poseen espectro puntual discreto y finito mientras que los segundos pueden tener espectro continuo o autovalores de multiplicidad infinita, de ahí que la motivación de las defínciones anteriores.

En la discusión siguente $T\in B(H)$. El problema fundamental de la teoría espectral de operadores es la solución de

$$Tu=\lambda u$$

y este problema puede plantearse en términos de proyecciones.

Supongamos que $\lambda\in\sigma(T)$ es aislado y de multiplicidad finita, $\{\phi_k\}$ es una B.O.N. del λ-espacio E_λ, por tanto la proyección sobre E_λ es

$$P_\lambda=\sum_{k=1}^{m_\lambda} |\phi_k\rangle\langle\phi_k|$$

y P_λ conmuta con T, lo que permite descomponer a H en subespacios invariantes bajo T

$$H=E_\lambda\oplus E_\lambda^\perp \quad ;$$

$$T E_\lambda=E_\lambda \quad y \quad T E_\lambda^\perp\subset E_\lambda^\perp .$$

Ahora invirtiendo el razonamianeto tenemos la

Proposición (5.1). Sea $T\in B(H)$ y P una proyección ortogonal que conmuta con T Entonces el espacio H admite la descomposición

$$H=\text{Rango}(P)\oplus\text{Rango}(1-P)$$

donde Rango(P) y su complemento ortogonal son invariantes bajo T, de manera que T puede expresarse como

$$T=PTP+(1+P)T(1-P) \quad ; T_P=PTP \quad y\ T_{1-P}=(1-P)T(1-P),$$

donde T_P es la restricción de T a Rango(P) y lo mismo en el caso de T_{1-P} y Rango(1-P).

Demostración.

a) es inmediato que por ser P una proyección ortogonal su rango es un subespacio cerrado entonces, por el teorema de proyección y Teo. (4.1) , tenemos

$$H=\text{Rango}(P)\oplus\text{Rango}(1-P)$$

b) P conmuta con T entonces

$$TPu=PTu\in\text{Rango}(P) \quad \text{para cada } u\in H$$

y por tanto Rango(P) y Rango(1-P) son invariantes bajo T.

c) $T_P=PTP=PT=TP$ es la restricción de T a Rango(P) y lo mismo ocurre con T_{1-P} por tanto T puede expresarse como

$$T=T_P\oplus T_{1-P}$$

donde la suma ortogonal de los operadores T_P, T_{1-P} se define como

$$Tu=T_P Pu+T_{1-P}(1-P)u.$$

De la proposición anterior se deduce que el problema de diagonalizar a T equivale a encontrar todos sus subespacios invariant

2. Analiticidad de la resolvente $R(z,T)$ en $z\in\mathbb{C}$

En esta sección supondremos que $T\in B(H)$; ahora daremos algunas identidades importantes .

Notación. Cuando no haya dudas escribiremos $R(z)=R(z,T)$.

Proposición (5.2) (Primera Identidad Resolvente). Si $z_1, z_2 \in \rho(T)$ entonces

$$R(z_1)-R(z_2)=(z_1-z_2)\,R(z_1)\,R(z_2) = (z_1-z_2)\,R(z_2)\,R(z_1).$$

Consecuencia inmediata de este resultado es el desarrollo en serie de Taylor de la resolvente alrededor de $z\in\rho(T)$, lo que da una prueba inmediata de que la resolvente es una función analítica de z, resultado que explotaremos en todo el trabajo.

Teorema (5.3). Sea $T\in B(H)$ y $z_0\in\rho(T)$ Entonces

a) para cada $z\in D(z_0, \|R(z_0)\|^{-1})$ se cumple

$$R(z)=\sum_{K=0}^{\infty}(z-z_0)\;R(z_0)^{K+1}$$

donde la serie converge en la norma de operadores

b) $\rho(T)$ es un conjunto abierto de $\mathbb{C}$ y por tanto $\sigma(T)$ es cerrado

c) para cada $|z|>\|T\|$ se cumple

$$R(z)=\sum_{K=0}^{\infty} z^{-K-1}T^{K}.$$

Corolario (5.4). Si $T\in B(H)$ entonces $R(z)$ es una función analítica en cada punto $z\in\rho(T)$.

Corolario (5.5). Si $T\in B(H)$ entonces $\sigma(T)$ NO ES VACIO.

Proposición (segunda identidad resolvente). Si $S,T\in B(H)$ entonces para cada $z\in\rho(T)\cap\rho(S)$ se cumple

$$R(z,T)-R(z,S)=R(z,T)\,(T-S)\,R(z,S) = R(z,S)\;(T-S)\;R(z,T).$$

3. Singularidades de la resolvente

La mayoria de los operadores de interes físico tiene autovalores aislados de multiplicidad finita, por lo cual asumiremos que el operador $T\in B(H)$ es autoadjunto y tiene tales autovalores.

La resolvente $R(z)$ como función analítica de z tiene una singularidad en cada punto del espectro, en particular cada autovalor es una singularidad.

Ahora probaremos que los residuos de la integral

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{\Gamma} R(z)\,dz \qquad ,\ \Gamma\subset\mathbb{C} \text{ curva cerrada}$$

son las proyecciones sobre los λ-espacios E_λ de los autovalores que encierra la curva Γ .

1) Supongamos que $\Gamma\subset\rho(T)$ encierra un autovalor aislado λ (con multiplicidad$=m_\lambda$), por tanto la serie de Laurent alrededor de es

$$R(z)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}(z-\lambda)^n A_n \quad ; \quad A_n=\frac{1}{2\pi i}\int_{\Gamma}(z-\lambda)^{-n-1}R(z)\,dz$$

y para otra Γ' curva cerca de Γ tenemos

$$A_n A_m = \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^2 \int_{\Gamma'} \int_{\Gamma} (z-\lambda)^{-n-1} (z'-\lambda)^{-m-1} R(z) R(z')\, dz\, dz'$$

que se reduce ,usando la primera identidad resolvente, a

$$A_n A_m = (\tau_n + \tau_m - 1) A_{n+m+1} \quad ; \quad \tau_n = \begin{cases} 1 & n \geq 0 \\ 0 & n < 0. \end{cases}$$

Para n=m=-1 queda $A_{-1}^2 = -A_{-1}$ por tanto

$$P_\lambda = \frac{-1}{2\pi i} \int_\Gamma R(z)\, dz$$

es idempotente y autoadjunto (ya que R(z) es acotado), entonces P_λ es una proyección. Es inmediato que P_λ conmuta con T

$$T P_\lambda = -\frac{1}{2\pi i} \int_\Gamma T R(z)\, dz = -\frac{1}{2\pi i} \int_\Gamma R(z) T\, dz = P_\lambda T$$

por tanto Rango(P) es un subespacio invariante de T, que es precisamente el subespacio propio asociado a λ .

2) Definiendo $D_\lambda = -A_{-2}$ y $S_\lambda^{n+1} = A_n$ (n>0) tenemos

$$A_{-k} = -D^{k-1} \quad , \quad k \geq 2 \; ;$$

$$P_\lambda D_\lambda = D_\lambda P_\lambda = D_\lambda \quad y \quad P_\lambda S_\lambda = S_\lambda P_\lambda = 0 \; ,$$

$$R(z) = -(z-\lambda)^{-1} P_\lambda - \sum_{n=1}^{\infty} (z-\lambda)^{-n-1} D_\lambda^n + \sum_{n=0}^{\infty} (z-\lambda)^n S_\lambda^{n+1}.$$

Como la parte principal de la serie de Laurent es convergente, el radio espectral de D_λ definido como

$$\mathrm{rsp}(D_\lambda) = \lim \| D_\lambda^n \|^{1/n}$$

es cero, ya que la serie

$$\sum_{n=1}^{\infty} (z-\lambda)^{-n-1} D_\lambda^n = \xi \sum_{n=1}^{\infty} \xi^n D_\lambda^n \quad , \; \xi = (z-\lambda)^{-1}$$

es convergente en el disco D(0,e) con $0<e< 1/\mathrm{rsp}(D_\lambda)$ arbitrariamente pequeño, y para $\xi \neq 0$, por tanto

$$0 < |\xi| = \frac{1}{|z-\lambda|} < \frac{1}{\mathrm{rsp}(D_\lambda)} \quad \rightarrow \quad 0 \leq \mathrm{rsp}(D_\lambda) < |z-\lambda| < e$$

lo que implica que D_λ es nilpotente; es decir, $D_\lambda^{m_\lambda}=0$ apartir de m_λ(dimensión de Rango(P)). Resumiendo, cada autovalor aislado y de multiplicidad m_λ es un polo de R(z) de orden m_λ .

3) La generalización es : si Γ encierra un numero finito $\{\lambda_k\}$ de autovalores aislados de multiplicidad finita del operador T entonces

$$P = \frac{-1}{2\pi i} \int_\Gamma R(z)\, dz$$

es la proyección sobre la suma directa de los subespacios propios de los autovalores λ_k .

Nota. La última ecuación es fundamental ya que relaciona de directamente a la resolvente R(z) con las proyecciones sobre subespacios invariantes de T. La generalización para operadores no acotados la mostraremos en (II,$4.3).

$6. Operadores Compactos y Autoadjuntos

1. Definición

Los operadores compactos son los que más se parecen a las matrices en espacios de dimensión finita, la mayor diferencia es que un operador compacto en un espacio de dimension INFINTA puede tener infinitos autovalores mientras que las matrices finitas sólo tiene un número finito; como veremos las matrices en R^m son casos particulares de operadores compactos.

Def. Un operador $T:H_1 \text{-->} H_2$ es compacto si la imagen $\{Tf_k\}$ de cada sucesión $\{f_k\} \subset H_1$ acotada contiene una subsucesión convergente.

Nota. El concepto de operador compacto se da entre espacios de Hilbert distintos, no necesita ser un operador que actue en el mismo espacio, un ejemplo de operador compacto entre espacios de Hilbert distintos son los potenciales relativamente compactos que estudiaremos en el capítulo siguiente.

Teorema (6.1). Cada operador compacto es acotado.

El recíproco es falso en general , por ejemplo la resolvente del operador de Schröedinger asociado a un átomo o molécula es un operador acotado pero tiene espectro continuo, lo que probaremos en el capítulo siguiente, por tanto no puede ser un operador compacto. En el siguiente teorema damos otras propiedades de operadores compactos, entre las que destaca que la composición de un operador compacto con un acotado da un operador compacto.

Teorema (6.2). Sean H_1, H_2 y H_3 espacios de Hilbert .
a) si $S \in B(H_1, H_2)$, $T \in B(H_2, H_3)$ y uno de estos operadores es compacto Entonces ST es compacto
b) suma de operadores compactos es un operador compacto
c) T es compacto si y sólo si T^* es compacto.

Ejemplo 8. El operador identidad I:H-->H , H tiene dimensión infinta,

$$I f = f$$

es acotado pero no es compacto ya que la esfera unitaria en espacios de dimensión infinta no tiene cerradura compacta.

2. Aproximación por matrices finitas

Desde el punto de vista numérico o computacional los operadores compactos son los únicos que pueden tratarse como si fueran matrices finitas de la manera que estudiaremos a continuación.

Def. Un operador T se llama de rango finito si Rango(T) tiene dimensión finita.

Teorema. Un operador $T \in B(H)$ es de rango finito (=m) si y sólo si existen dos conjuntos linealmente independientes $\{f_k\}$, $\{g_k\}$

tales que

$$Tf = \sum_{K=1}^{m} \langle f_K | f \rangle g_K = \sum_{K=1}^{m} |g_K\rangle\langle f_K| \cdot f$$

en tal caso $\|T\| \leq \sum_{K=1}^{m} \|f_K\| \cdot \|g_K\|$, sin perder generalidad puede asumirse que los conjuntos de vectores mencionados forman un sistema ortonormal.

Este teorema afirma que cada operador de rango finito puede verse como una matriz finita de la forma

$$T_{ij} = \langle \phi_i | T | \phi_j \rangle \quad , \{\phi_j\} = \text{B.O.N de } H.$$

Corolario. Todo operador de rango finito (matriz finita) es compacto.

La importancia de los operadores de rango finito la da el

Teorema (6.3). Un operador $T \in B(H)$ es compacto si y sólo si existe una secuencia $\{T_K\}$ de operadores de rango finto (matrices finitas) que convergen a T en la norma de operadores

$$\lim \|T_K - T\| = 0.$$

Ejemplo 10. Sea H separable (como $L2(\Omega)$ o $W_K^0(\Omega)$) , por tanto tiene una base ortonormal numerable $\{\phi_K\}$ que define las proyecciones ortogonales

$$P_N = \sum_{K=1}^{N} |\phi_K\rangle\langle\phi_K|$$

con las cuales obtenemos los operadores de rango finito (=N)

$$T_N = P_N \, T \, P_N$$

con la representación matricial

$$T_{K\ell}^{(N)} = \langle \phi_K | T | \phi_\ell \rangle \quad , \quad 1 \leq K \leq \ell \leq N.$$

La pregunta inmediata es en que sentido converge la sucesión $\{T_N\}$ al operador T, la respuesta cuando T es compacto la da el teorema siguiente.

Teorema (6.4). Si la sucesión de proyecciones $\{P_N\}$ satisface

i) $P_K \xrightarrow{s} 1$ (converge fuertemente al operador identidad)

ii) $P_K \leq P_{K+1}$

y el operador T es compacto Entonces

$$\lim \|T_K - T\| = 0$$

donde $\|\cdot\|$ es la norma de operadores en B(H).

El teorema anterior es fundamental para probar que el espectro y los vectores propios de la sucesión de matrices $\{T_K\}$ converge a los de T y sólo a ellos.

Ejemplo 3 (continuación). Hemos probado que el operador integral

$$A : L_2(\Omega) \circlearrowleft \quad , \quad Af(x) = \int_\Omega K(x,y) f(y)\, dy$$

cuyo kernel K(x,y) pertenece a $L2(\Omega) x L2(\Omega)$:

$$M^2 = \int_\Omega dx \int_\Omega dy \, |K(x,y)|^2 = \|K(x,y)\|^2_{L_2 \times L_2} < \infty$$

es acotado y $\|A\| \leq M$.

Ahora demostraremos que A es COMPACTO (no necesariamente autoadjunto), mostrando que A es límite en la norma de operadores de una secuencia de operadores de rango finito las cuales se construyen como en el ejemplo anterior.

La hipótesis $K(x,y)\in L2(\Omega)xL2(\Omega)$ implica que

$$K(x,y)=\sum_{m,n=1}^{\infty} a_{mn}\,\phi_m(x)\,\phi_n^*(y)$$

donde $\{\phi_k\}$ es una B.O.N. de $L2(\Omega)$, y por tanto $\{\phi_m(x)\phi_n^*(y)\}$ es una B.O.N. de $L2(\Omega)xL2(\Omega)$.

El kernel

$$K_N(x,y)=\sum_{m,n=1}^{N} a_{mn}\,\phi_m(x)\,\phi_n^*(y)$$

define el operador integral A_N de rango finito y por tanto es compacto.

Ahora probemos $\|A_N-A\|$ -->0 : A_N-A es al operador integral

$$(A_N-A)f(x)=\int_\Omega [K_N(x,y)-K(x,y)]\,f(y)\,dy\ ;$$

cuya norma satisface

$$\|A_N-A\|\leq\left\{\int_\Omega dx\int_\Omega dy\ |K_N(x,y)-K(x,y)|^2\right\}^{1/2}=\|K_N-K\|_{L_2xL_2}$$

y como $K(x,y)=\lim K_N(x,y)$ en la norma de $L2(\Omega)xL2(\Omega)$:

$$\lim\|K_N-K\|_{L_2xL_2}=0$$

entonces $\lim\|A_N-A\|=0$; es decir A es límite en la norma de operadores de la sucesión de operadors compactos A_N por tanto A es compacto.

3. Teoría espectral de operadores Compactos

Los operadores compactos vistos como matrices infinitas tiene un espectro muy parecido a las matrices finitas, lo que mostraremos en esta sección.

Teorema. Sea H de dimensión infinta, si $T\in B(H)$ es compacto entoces $0\in\sigma(T)$.

La prueba es inmediata ya que si el cero pertenece a $\rho(T)$ entonces T^{-1} existe y es acotado y por tanto el operador identidad

$$I=T^{-1}\circ T$$

es compacto por ser composición de un operador acotado con uno compacto, lo cual es absurdo.

Teorema (6.5). Si el operador $T\in B(H)$ es compacto entonces

a) el espectro $\sigma(T)$ consta de autovalores aislados y el cero.
b) cada autovalor no nulo es de multiplicidad finita.
c) si H es de dimensión infinta entonces el cero es el único punto de acumulación de los autovalores de T.
d) λ es un autovalor de T si y sólo si λ^* lo es de T^* .

Hasta aquí solo hemos pedido que T sea compacto, pero en los casos de interés es autoadjunto, lo que permite dar un teorema espectral como en el caso de matrices finitas.

TEOREMA (6.6) ESPECTRAL PARA OPERADORES COMPACTOS Y

1

AUTOADJUNTOS: Sea $T \in B(H)$ compacto y autoadjunto. Si $\{a_1, a_2, ..\}$ son los autovalores no nulos de T y P_j las proyecciones sobre los a_j-espacios, entonces

$$T = \sum_{j=1}^{\infty} a_j P_j \quad ;$$

esta serie converge en la norma de operadores.

Nota. En el ejemplo 4 hemos definido el operador diferencial

$$T_1 : L_2(-n,n) \circlearrowleft \quad ; \quad D(T_1) = \{ f \in D(T) \mid f(-n) = f(n) = 0 \} \quad ;$$

$$T_1 f = -\frac{d^2}{dx^2} f + q(x) f \quad ;$$

que no es acotado; sin embargo, su inversa y resolvente dados por el operador integral

$$R(z) f(x) = (T_1 - z)^{-1} f(x) = \int_{-n}^{n} G_z(x,y) f(y) dy$$

es un operador acotado sobre L2(-n,n); más aún, es un operador COMPACTO ya que el kernel $G_z(x,y)$ satisface (como acabamos de ver en el ejemplo anterior 3)

$$\int_{-n}^{n} dx \int_{-n}^{n} dy \ |G_z(x,y)|^2 < \infty$$

por tanto en lugar de trabajar con T_1 lo hacemos con su resolvente para aprovechar que puede aproximarse por matrices finitas (Teoremas (6.3) y ejemplo 10). Lo anterior permite probar que la solución de

$$T_1 u = \lambda u \qquad \text{con} \quad u(-n) = u(n) = 0$$

puede calcularse con la precisión deseada resolviendo la ecuación matricial

$$\sum_{k=1}^{N} \left[\langle \hat{\varphi}_i | T_1 | \hat{\varphi}_k \rangle - \lambda^{(N)} \delta_{ik} \right] u_k^{(N)} = 0 \quad , \ 1 \le i \le N$$

con un conjunto ortonormal $\{\hat{\varphi}_i\}$ cada vez más grande, y en el limite N-->∞ recuperamos los autovalores y autovectores de T y solo ellos; siempre y cuando $\{\hat{\varphi}_i\}_{i=1}^{\infty}$ sea una B.O.N. .

En el capítulo IV probamos que la resolvente del operador (definido apropiadamente en L2(Ω) con $\Omega \subset R^n$ acotada)

$$-\Delta + q(x)$$

también es compacta para una gran clase de potenciales q(x), por tanto las soluciones de

$$(-\Delta + q(x)) u = \lambda u \quad , \quad u(\partial\Omega) = 0$$

pueden calcularse con la precisión deseada simplemente diagonalizando las matrices finitas

$$\langle \hat{\varphi}_i | -\Delta + q | \hat{\varphi}_j \rangle \qquad , \ 1 \le i, j \le N$$

Nota. En los libros ordinarios de Mecánica Cuántica es común hallar que cualquier "operador" lineal T (diferencial o integral) puede "representarse" por medio de la matriz <u>infinita</u>

$$T_{ij} = \langle \phi_i | T | \phi_j \rangle \qquad , \ 1 \le i, j \le \infty$$

(donde $\{\phi_j\}$ es una B.O.N.) sin mencionar ninguna condición o hipótesis que deba satisfacer T y trivializan el resultado de que la matrices FINITAS

$$T_{ij}^{(N)} = \langle \phi_i | T | \phi_j \rangle \qquad , \ 1 \le i, j \le N$$

tienen un espectro y autovectores propios que "convergen" a los de T cuando N-->∞ (sin precisar lo que entienden por convergencia). Como acabamos de ver, esta aproximación por matrices finitas sólo es válida cuando T es compacto o tiene resolvente compacta en algún espacio de Hilbert

Lo anterior permite entender por que en esta época de supercomputadoras, los calculos "precisos" que resuelven en L2(R^n) la ecuación

$$\mathbb{H} u \equiv \left(-\Delta - \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{|x_i|} + \sum_{i<j}^{N} \frac{1}{|x_i - x_j|}\right) u = \lambda u$$

por el metódo de Ritz (o de proyecciones, que consiste en diagonalizar la representacion matricial de $\mathbb{H}$ en espacios de dimensión finita) NO tienen por que converger a las funciones propias de $\mathbb{H}$ ya que este operador NO tiene resolvente compacta por poseer un espectro CONTINUO (el Teo. (6.5) nos dice que una condicion necesaria para que un operador sea compacto es que su espectro sea estrictamente DISCRETO). Lo anterior pone en evidencia que los problemas de convergencia con los metodos actuales no dependen de la capacidad de computo sino del propio método.

$7. Formas Sesquilineales y Operadores Acotados

---

1. Representación de operadores acotados por formas sequilineales

En (I,$4) hemos definido las formas sesquilineales acotadas , de las que destacan las simétricas y positivas. En esta sección daremos la primera conección entre formas sesquilineales y operadores.

Teorema (7.1). Si $T \in B(H)$ es acotado entonces induce la f.s.l.

$$D(t) = D(T) = H \quad , \quad t(u,v) = \langle Tu|v\rangle$$

que es acotada y $\|t\| = \|T\|$.

La prueba es inmediata, ya que usando la desigualdad de Schwarz y la acotación de T tenemos

$$|t(u,v)| \leq \|T\| \cdot \|u\| \cdot \|v\| .$$

Este resultado es "trivial" pero menos obvia es el

Teorema (7.2). Cada f.s.l. t(.,.) acotada sobre H define un único operador acotado $T \in B(H)$ como aquel que satisface

$$t(u,v) = \langle u|Tv\rangle$$

y además $\|t\| = \|T\|$.

El teorema anterior es una forma restringida del Teorema de Extensión de Friedrichs, con el cual apartir de formas no acotadas obtenemos operadores no acotados.

2. El Teorema de Lax-Milgram

El teorema de Lax -Milgram sólo involucra a operadores y f.s.l acotados, su planteamiento y demostración son sencillos pero tiene importantes aplicaciones en la teoría de operadores lineales en espacios de Hilbert.

La primera aplicación del Teorema de Lax-Milgram es la de obtener extensiones autoadjuntas de operadores simétricos (mejor conocidas como extensión de Friedrichs). La segunda es la prueba de existencia de soluciones débiles a ecuaciones diferenciales con valores en la frontera.

Por sencillez asumamos que $t(.,.)$ es una f.s.l. simétrica y acotada por abajo por b, por tanto $t+\alpha$ define un producto interior $<.,.>_t$ para cada $\alpha<b$ y hace de $(H,<.,.>_t)$ un nuevo espacio de Hilbert (pensando en la complesión no perdemos generalidad). La esencia de Teorema de Lax-Milgram consiste en afirmar que los espacios $(H,<.,.>)$ y $(H,<.,.>_t)$ son exactamente el mismo espacio, generalizando al teorema de Riez.

Teorema (7.3) ,Lax-Milgram. Sea $(H,<.,.>)$ un espacio de Hilbert y $t(.,.)$ una forma sesquilineal simétrica sobre H para la cual existen dos constantes $k,\chi>0$ tales que

a) $|t(u,v)| \leq K\|u\| \cdot \|v\|$ (es acotada en H)

b) $t(u,u) > \chi\|u\|^2$ (es acotada por abajo por χ)

Entonces para cada funcional acotado $F\in H^*$ existe un único $u\in H$ con el cual F se puede expresar como

$$F(v) = t(u,v) \quad \text{para cada } v\in H$$

y además se satisface la desigualdad

$$\|u\| \leq \frac{1}{\chi}\|F\| ,$$

donde $\|F\|$ es la norma del funcional F.

§1. Operadores cerrados

1. Conceptos

El concepto de operador cerrado es la generalización inmediata de operador acotado, pues como veremos los operadores acotados son cerrados y cada operador cerrado induce un operador acotado en el dominio y la norma apropiados, en particular los operadores diferenciales sobre $L2(\mathbb{R}^m)$ son cerrados.

Def. Sean $(H_1,\langle .,. \rangle_1)$ y $(H_2,\langle .,. \rangle_2)$ espacios de Hilbert. Definimos el pre-espacio de Hilbert $(H_1 x H_2,\langle .,. \rangle)$ como

$$H_1 \times H_2 = \{ (x,y) \mid x \in H_1 \ , \ y \in H_2 \}$$

provisto de las operaciones de espacio vectorial

$$\lambda(x_1,y_1)+(x_2,y_2) = (\lambda x_1 + x_2 \ , \ \lambda y_1 + y_2)$$

y del producto interior $\langle (x_1,y_1),(x_2,y_2)\rangle = \langle x_1,x_2\rangle_1 + \langle y_1,y_2\rangle_2$.

Proposición. $(H_1 x H_2,\langle .,. \rangle)$ es un espacio de Hilbert.

Def. La gráfica $G(T)$ del operador $T:H_1 \dashrightarrow H_2$ es el subespacio de $H_1 x H_2$

$$G(T) = \{ (f, Tf) \mid f \in D(T) \}.$$

La gráfica $G(T)$ como subespacio de $H_1 x H_2$ puede ser un conjunto cerrado, lo que da origen al concepto de operador cerrado.

Def. El operador $T:H_1 \dashrightarrow H_2$ se llama cerrado si $G(T)$ es cerrado.

Cuando el operador T no es cerrado es posible que la cerradura $\overline{G(T)}$ de la gráfica sea la gráfica de un operador, ¿que propiedades debe tener $\overline{G(T)}$ para ser la gráfica de un operador?.

Proposición. $\overline{G(T)}$ es la gráfica de un operador $S:H_1 \dashrightarrow H_2$ si y sólo si $\overline{G(T)}$ es un subespacio de $H_1 x H_2$ que tiene la propiedad siguiente $(0,y)\in \overline{G(T)}$ implica $y=0$.

Demostración.
a) Si $\overline{G(T)}$ es la gráfica de un operador $S:H_1 \dashrightarrow H_2$ es evidente que es un subespacio y tiene la propiedad mencionada.

b) Ahora asumamos que $\overline{G(T)}$ es un subespacio con la propiedad mencionada, esta propiedad garantiza que S está bien definido, es decir , que no es un mapeo multivaluado. Construyamos al operador S :

definimos $D(S)=\{ f\in H_1 \mid$ existe un $g\in H_2$ tal que $(f,g)\in \overline{G(T)} \}$ y el mapeo $S:H_1 \dashrightarrow H_2$ como

$$Sf = g \quad \text{para cada } f \in D(S).$$

Primero mostremos que a cada $f\in D(S)$ le coresponde un único Sf, supongamos que hay dos g_1, g_2 H tales que $(f,g_1),(f,g_2)\in\overline{G(T)}$ entonces por ser $\overline{G(T)}$ espacio vectorial tenemos

$$(f,g_1)-(f,g_2)=(0,g_1-g_2)\in \overline{G(T)}$$

por tanto $g_1-g_2=0$.

Ahora mostremos que S es lineal: si $f_1, f_2 \in D(S)$ entonces

$$\lambda(f_1, Sf_1)+(f_2, Sf_2)=(\lambda f_1+f_2, \lambda Sf_1+Sf_2)$$

por tanto según la definición de D(S) a λf_1+f_2 le corresponde un único λSf_1+Sf_2 por tanto

$$S(\lambda f_1+f_2)=\lambda Sf_1+Sf_2 .$$

QED

Def. El operador $T:H_1 \dashrightarrow H_1$ se llama cerrable cuando $\overline{G(T)}$ es la gráfica de un operador al que llamamos $\overline{T}$.

Es evidente que $G(\overline{T})=\overline{G(T)}$, cuando un operador T es cerrable la siguiente proposición muestra como determinar $\overline{T}f$ con $f\in D(\overline{T})$ apartir de una secesión $\{(f_n, Tf_n)\}\subset G(T)$.

Proposición. Si $T:H_1 \dashrightarrow H_2$ es cerrable entonces

a) para cada $(x,y)\in G(\overline{T})$ existe una sucesión $\{(x_n, Tx_n)\}\subset G(T)$ que converge a (x,y) :

$$\lim \|x_n-x\|=0 \quad y \quad \lim \|Tx_n-Tx\|=0$$

b) $T\subset\overline{T}$.

Demostración. Es inmediato de la definición de cerradura de un conjunto, que $(x,y)\in G(\overline{T})$ si y sólo si existe una sucesión $\{(x_n, Tx_n)\}$ en $G(T)$ que converge a (x,y) en la norma de la gráfica

$$\lim \|(x_n, Tx_n)-(x, Tx)\|=0$$

entonces

$$\lim \|x_n-x\|=0 \quad y \quad \lim \|Tx_n-Tx\|=0 ,$$

de donde se obtiene (a), en particular para la sucesión constante $\{(x,Tx)\}$ con $x\in D(T)$ tenemos $Tx=\overline{T}x$ por tanto $T\subset\overline{T}$.

De la definición de operador cerrado es inmediata la siguiente caracterización .

Teorema (1.1). Sobre el dominio $D(T)$ del operador $T:H_1 \dashrightarrow H_2$ definimos el producto escalar (de la gráfica)

$$\langle f | g\rangle_T = \langle f|g\rangle + \langle Tf | Tg\rangle$$
$$\|f\|_T = \langle f|f\rangle_T^{1/2} = \{\|f\|^2+\|Tf\|^2\}^{1/2}$$

para $f,g\in D(T)$. El operador T es cerrado si y sólo si $(D(T), \langle .,.\rangle_T)$ es un espacio de Hilbert.

El siguiente teorema resalta la importancia de que un operador sea densamente definido y la utilidad del adjunto para saber cuando es cerrable un operador. Recordemos que si un operador es densamente definido entonces su adjunto está bien definido (II-$3.1).

Teorema (1.2). Sea $T:H_1 \dashrightarrow H_2$ densamente definido. Entonces

a) T^* es cerrado

b) T es cerrable si y sólo si T^* es densamente definido

c) Si T es cerrable entonces $\overline{T}=T^{**}$ y $(\overline{T})^*=T^*$.

Ejemplo 1. Operadores acotados .

Cada operador acotado $T\in B(H_1,H_2)$ acotado es cerrado ya que $D(T)=H_1$.

Ejemplo 2. El operador derivada.

a) En el capítulo anterior (ejemplo 1) mostramos que el operador

$$T_0 : L_2(-n,n) \circlearrowleft \; , D(T_0)=C_0^\infty(-n,n) \; , \; T_0 f = \frac{d}{dx} f$$

NO es acotado, pero es cerrable ya que su adjunto es densamente definido (por Teorema 1.2)

$$T_0^* f = -\frac{d}{dx} f \quad \text{para } f \in C_0^\infty(-n,n) \subset D(T^*)$$

b) ¿quién es la cerradura $\overline{T}_0$ de T_0?. El operador

$$T_2 : L_2(-n,n) \circlearrowleft \; , D(T_2)=W_1^0(-n,n) \; , \; T_2 f = \frac{d}{dx} f$$

(la derivada es distribucional) es una extensión de T_0 y si observamos que el producto interior de la gráfica

$$\langle f | g \rangle_{T_2} = \langle f | g \rangle + \langle \frac{df}{dx} | \frac{dg}{dx} \rangle$$

es precisamente el producto interior $\langle .,. \rangle_1$ con el cual $W_1^0(-n,n)$ es un espacio de Hilbert (I,$2.3) entonces T_2 es cerrado. Ya que la complesion de $(D(T_0),\langle .,. \rangle_1)$ es $(W_1^0(-n,n),\langle .,. \rangle_1)$ entonces $\overline{T}_0=T_2$ (por Teo. 1.1).

2. Teorema de la Gráfica Cerrada

Hemos visto que todo operador acotado es cerrado, pero la implicación contraria es falsa en general como muestra el ejemplo del operador derivada, ¿cuál es la diferencia entre un operador cerrado y uno acotado?, la respuesta está en el dominio del operador como establece el

Teorema (1.3).(Banach: Teorema de la gráfica cerrada).
Si $T:H_1 \dashrightarrow H_2$ es un operador y $H_{1,2}$ son espacios de Hilbert Entonces los enunciados siguientes son equivalentes .

a) T es cerrado y $D(T)$ es cerrado

b) T es acotado y $D(T)$ es cerrado

c) T es acotado y cerrado.

Nota. Deacuerdo al teorema (1.3), T acotado y cerrado implica que $D(T)$ es cerrado pero no implica que $D(H)=H$; esta sutileza es fundamental para distinguir entre operadores autoadjuntos y simétricos.

El siguiente teorema muestra porque un operador cerrado puede verse como un operador acotado cambiado al espacio adecuado (su grafica con la norma).

Proposición. Cada operador cerrado $T:(H_1,\langle .,. \rangle_1) \dashrightarrow (H_2,\langle .,. \rangle_2)$ induce un operador acotado $\hat{T}:(D(T),\langle .,. \rangle_T) \dashrightarrow (H_2,\langle .,. \rangle_2)$

$$\begin{tikzcd}
(D(T), \langle \cdot | \cdot \rangle_T) \arrow[dr, "\hat{T}", "\text{acotado}"'] & \\
(D(T) \subset H_1, \langle \cdot | \cdot \rangle_1) \arrow[u, dotted] \arrow[r, "T", "\text{cerrado}"'] & (H_2, \langle \cdot | \cdot \rangle_2)
\end{tikzcd}$$

$$\hat{T} f = T f \quad \text{para } f \in D(T)$$

Nota. Como establece la proposición anterior un operador cerrado puede "transformarse" en uno acotado cambiando de dominio (su gráfica con la norma $\|\cdot\|_T$) lo que permite recuperar algunos conceptos de operadores acotados, pero este esquema no puede aplicarse para tratar de resolver el problema de autoavalores ya que el operador debe actuar siempre en el mismo espacio.

Ejemplo 2 (continuación). El operador derivada

En el capítulo anterior (ejemplo 1) al estudiar el operador derivada definimos el operador

$$T_1:(W_1^0(-n,n),\langle\cdot|\cdot\rangle_1)\to(L_2(-n,n),\langle\cdot|\cdot\rangle)\ ;\ D(T_1)=C_0^\infty(-n,n)\ ;\quad T_1 f=\frac{df}{dx}$$

el cual es acotado y por tanto tiene una única extension $\overline{T}_1$ acotada cuyo dominio es todo $W_1^0(-n,n)$ y este es precisamente el operador acotado $\hat{T}_2$, ya que T_2 es cerrado

$$\begin{tikzcd}
(D(T_2),\langle\cdot|\cdot\rangle_{T_2})=(W_1^0(-n,n),\langle\cdot|\cdot\rangle_1) \arrow[dr, "\hat{T}_2=\overline{T}_1", "\text{acotado}"'] & \\
(D(T_2)\subset L_2(-n,n),\langle\cdot|\cdot\rangle) \arrow[r, "T_2", "\text{cerrado}"'] & (L_2(-n,n),\langle\cdot|\cdot\rangle)\ .
\end{tikzcd}$$

$$\overline{T}_1 f=\hat{T}_2 f=T_2 f \quad \text{para } f\in D(T_2)$$

Finalmente daremos un resultado importante en relación con la resolvente $(z-T)^{-1}$ de un operador cerrado T y la teoría espectral.

Teorema (1.4). Sea T cerrable e inyectivo. T^{-1} es cerrable si y sólo si $\overline{T}$ es inyectivo, en tal caso $\overline{T^{-1}}=\overline{T}^{-1}$; si $\overline{T}^{-1}$ es acotado entonces Rango($\overline{T}$) es igual $\overline{\text{Rango}(T)}$.

3. Operador maximal de multiplicación sobre L2(Ω)

En el capítulo anterior estudiamos algunos ejemplos de operadores de multiplicación, acotados y no acotados , pero en cualquier caso siempre son cerrados, cualidad que los distingue y de gran importancia ya que permiten dar una caracterización completa de los operadores diferenciales sobre L2(R^m) con coeficientes constantes. Asumimos que $\Omega\subseteq R^m$ es una region abierta.

Proposición. Sea $q:R^m\text{-->}R$ localmente cuadrado integrable. Entonces el operador maximal de multiplicación

$$Q:L_2(\Omega)\circlearrowleft\ ,\ D(Q)=\{f\in L_2(\Omega)\,|\,qf\in L_2(\Omega)\ ;\ Qf=qf\}$$

es CERRADO .

Demostración. Sabemos que Q es densamente definido ya que $C_0^\infty(\Omega)$ está contenido en D(Q) por tanto Q^* está bien definido y además como $D(Q)=D(Q^*)$, Q^* es densamente definido y por tanto Q es cerrable. Ya que $D(Q)=D(Q^*)$ y

$$\langle f|g\rangle_Q=\langle f|g\rangle_{Q^*}\qquad \text{para}\quad f,g\in D(Q)$$

se desprende que $(D(Q),\langle .,.\rangle_Q)$ es cerrado si y sólo si $(D(Q^*),\langle .,.\rangle_{Q^*})$ es cerrado, por tanto Q es cerrado (ya que Q^* es cerrado, según Teo. 1.2a).

4. Acotación relativa de operadores. Estabilidad de Cerradura bajo perturbaciones

La cerradura de un operador $T:H_1 \dashrightarrow H_2$ es una propiedad importante y es deseable saber cuándo sigue siendo cerrado el operador $T+Q$ bajo ciertas perturbaciones Q, en esta sección damos condiciones suficientes sobre Q que garantizan la estabilidad de la cerradura.

En el caso de operadores acotados el problema es trivial ya que si $T,Q:H_1 \dashrightarrow H_2$ son acotados en $D(T)\cap D(Q)$ entonces $T+Q$ es acotado; sin embargo, cuando T es cerrado y no acotado los problemas de perturbaciones se complican.

La idea básica de la teoría de perturbaciones de operadores cerrados consiste en trabajar en la gráfica del operador (donde es acotado) en la cual las perturbaciones se clasifican como acotadas o no.

En esta seccion asumimos que $T:H_1 \dashrightarrow H_2$ es un operador cerrado y por tanto $\hat{T}:(D(T),\langle .,.\rangle_T) \dashrightarrow (H_2,\langle .,.\rangle_2)$ es acotado. para clasificar la perturbación $Q:H_1 \dashrightarrow H_2$ estudiamos sus propiedades cuando actua como un operador $Q:(D(T),\langle .,.\rangle_T) \dashrightarrow (H_2,\langle .,.\rangle_2)$:

$$\begin{tikzcd}
(D(T),\langle\cdot|\cdot\rangle_T) \arrow[dr, "\hat{T}", "\text{acotado}"'] & \\
(D(T)\subset H_1,\langle\cdot|\cdot\rangle_1) \arrow[u, dashed] \arrow[r, "T", "\text{cerrado}"'] & (H_2,\langle\cdot|\cdot\rangle_2)
\end{tikzcd}
\qquad
\begin{tikzcd}
(D(T),\langle\cdot|\cdot\rangle_T) \arrow[dr, "\hat{Q}"] & \\
(D(T)\subset D(Q)\subset H_1,\langle\cdot|\cdot\rangle_1) \arrow[u, dashed] \arrow[r, "Q"] & (H_2,\langle\cdot|\cdot\rangle_2)
\end{tikzcd}
\qquad \hat{Q}f=Qf \text{ para } f\in D(T) \;.$$

Es claro que para poder definir a Q sobre la gráfica de T es necesario que $D(Q)\supset D(T)$.

Def. El operador $Q:H \dashrightarrow H$ se llama T-acotado si satisface
a) $D(Q)\supset D(T)$
b) Q es acotado sobre la gráfica de T (en la norma $\|\cdot\|_T$); es decir, existe una constante $C\geq 0$ tal que

$$\|Qf\|\leq C\|f\|_T = C\{\|f\|^2+\|Tf\|^2\}^{1/2} \quad \text{para } f\in D(T).$$

Si el operador Q es T-acotado entonces

$$\|Qf\|\leq C\|f\| + C\|Tf\| \;;$$

al ínfimo de todos los $b>0$ para los cuales existe una constante $a\geq 0$ tal que

$$\|Qf\|\leq a\|f\| + b\|Tf\| \;,$$

se le llama T-cota de Q.

Si un operador Q es T-acotado tenemos una condición equivalente de acotación relativa.

Proposición. Sea Q un operador T-acotado entonces las desigualdades siguientes son equivalentes para $\varepsilon>0$ arbitrario y tomando $a'^2=(1+\varepsilon^{-1})a^2$ y $b'^2=(1+\varepsilon)b^2$,

$$\|Qf\|\leq a\|f\|+b\|Tf\| \text{ si y sólo si } \|Qf\|^2\leq a'^2\|f\|^2+b'^2\|Tf\|^2 \;,$$

en particular b es arbitrariamente pequeño si y sólo si b' lo es.

Ejemplo 1 (continuación). Operador acotado.

Si $T:H_1 \to H_2$ es cerrado entonces cada operador acotado $Q \in B(H_1,H_2)$ es T-acotado ya que

$$H_1 = D(Q) \supset D(T) \quad y \quad \|Qf\| \leq \|Q\| \cdot \|f\| + (0)\|Tf\| ,$$

por tanto la T-cota de Q es cero.

Ahora enunciemos el primer teorema de estabilidad.

Teorema (1.5). Sean $T,Q:H_1 \to H_2$ operadores tales que T es cerrado (cerrable) y Q es T-acotado con T-cota<1 . Entonces T+Q es cerrado con $D(T+Q)=D(T)$ (T+Q es cerrable y $D(\overline{T+Q})=D(\overline{T})$).

La prueba es sencilla ya que las normas $\|\cdot\|_T$ y $\|\cdot\|_{T+Q}$ son equivalentes por tanto $G(T)$ es cerrado si y sólo si $G(T+Q)$ es cerrado.

5. Estabilidad de invertibilidad acotada.

En esta sección damos un criterio sobre Q que garantiza que T+Q tiene inversa acotada cuando T tiene inversa acotada.

Teorema (1.6). Sea $T:H \circlearrowleft$ cerrado con inversa $T^{-1} \in B(H)$ acotada. Si el operador $Q:H \circlearrowleft$ satisface

a) $D(Q) \supset D(T)$

b) $\|QT^{-1}\| < 1$

Entonces T+Q es inyectivo, $(T+Q)^{-1} \in B(H)$ y

$$(T+Q)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n T^{-1}(QT^{-1})^n ,$$

donde la serie converge en la norma de operadores.

Demostración.

a) T+Q es cerrado ya que Q tiene T-cota<1

$$\|Qf\| = \|QT^{-1}Tf\| \leq \|QT^{-1}\| \cdot \|Tf\| ,$$

b) T+Q es inyectivo y acotado

$$(T+Q)^{-1} = [(1+QT^{-1})T]^{-1} = T^{-1}(1+QT^{-1})^{-1} ,$$

T^{-1} es acotado y como $\|QT^{-1}\|<1$ entonces $(1+QT^{-1})^{-1}$ es acotado. QED

---

§2. Operadores Simétricos, Autoadjuntos y Esencialmente Autoadjuntos.

---

1. Conceptos

Los conceptos de operador simétrico y adjunto son los mismos para operadores acotados y no acotados (II,§3.2), pero al trabajar con un operador no acotado T y cerrado debe tenerse cuidado de trabajar en el dominio del operador, ya que no todo el espacio es su dominio (de lo contrario seria acotado según el teorema de la gráfica cerrada).

Daremos algunas propiedades interesantes de los operadores simétricos.

Teorema (2.1).

a) Cada operador simétrico $T:H\circlearrowleft$ es cerrable

b) La cerradura T de un operador simétrico es un operador simétrico.

Demostración.
a) si T es simétrico entonces $T\subset T^*$ por tanto T^* es densamente definido lo que implica que T es cerrable (Teo. 1.2b).
b) Sea $\bar{T}$ la cerradura de T, si $f,g\in D(\bar{T})$ entonces existen sucesiones $\{f_n\}$ y $\{g_n\}$ en D(T) tales que

$$\lim f_n = f \quad y \quad \lim Tf_n = \bar{T}f \quad ; \text{lo mismo con } (g_n) \text{ y } (Tg_n),$$

por tanto $\langle \bar{T}f|g\rangle = \lim\langle Tf_n|g_n\rangle = \lim\langle f_n|Tg_n\rangle = \langle f|\bar{T}g\rangle$. QED

Def. Un operador simétrico $T:H\circlearrowleft$ se llama esencialmente autoadjunto si $\bar{T}=T^*$ (y por tanto $\bar{T}$ es autoadjunto).

El conjunto de operadores esencialmente autoadjuntos es muy importante ya que son fáciles de caracterizar y a él pertenecen la mayoria de los operadores diferenciales sobre $L2(R^m)$ con coeficientes constantes reales y cuyo dominio es $C_0^\infty(R^m)$, esta propiedad no cambia bajo un enorme clase de perturbaciones como el potencial coulombiano.

Nota. El adjunto T^* de un operador simétrico no es simétrico en general, excepto cuando T es esencialmente autoadjunto como afirma el teorema siguiente.

Teorema. Un operador $T:H\circlearrowleft$ simétrico es esencialmente autoadjunto si y sólo si T^* es simetrico.

Ejemplo 3. Operador maximal de multiplicación.

Cada operador de multiplicación Q simétrico automáticamente es autoadjunto ya que $Q^*=Q$ es simétrico.

Proposición. Para el operador maximal de multiplicación $Q:L2(\Omega)\circlearrowleft$ los enunciados siguientes son equivalentes
a) Q es simétrico
b) Q es autoadjunto
c) q(x) es real-valuada.

Ejemplo 4. Operador minimal de Schröedinger el $L2(R^m)$.

1) El operador minimal $\mathbb{H}_0:L2(R)\circlearrowleft$ dado por

$$D(\mathbb{H}_0)=C_0^\infty(R) \quad , \quad \mathbb{H}_0 f = -\frac{d^2}{dx^2}f + q(x)f$$

(donde q:R-->R es real valuada y localmente cuadrado integrable) es simétrico ya que integrando por partes tenemos

$$\langle \mathbb{H}_0 f|g\rangle = \langle f|\mathbb{H}_0 g\rangle$$

y por tanto es cerrable (Teo. 2.1).

2) El operador minimal $\mathbb{H}_0:L2(R^m)\circlearrowleft$ está dado por

$$D(\mathbb{H}_0)=C_0^\infty(R^m) \quad , \quad \mathbb{H}_0 f = -\Delta f + qf$$

donde $q:R^m$-->R es real valuada y localmente cuadrado integrable. Como en (1), $\mathbb{H}_0$ es simétrico y por tanto cerrable. En la sección \$4.4 mostramos que $\mathbb{H}_0$ es esencialmente autoadjunto para una gran familia de potenciales que incluye a casos como x^2 y el potencial de Coulomb $-1/r$.

Ejemplo 5. Operador minimal de Schröedinger en región acotada.

1) El operador minimal $\mathbb{H}_n^0 : L2(-n,n) \circlearrowleft$ dado por

$$D(\mathbb{H}_n^0) = C_0^\infty(-n,n) \quad ; \quad \mathbb{H}_n^0 f = -\frac{d^2}{dx^2} f + q f$$

($q(x)$ como en ejemplo 4) es simétrico y por tanto cerrable.

Hay varias extensiones de $\mathbb{H}_n^0$ que dependen de las condiciones de frontera que se impongan a los elementos del dominio, de las cuales destacan:

i) Extension con condiciones de frontera tipo Dirichlet

$$D(\mathbb{H}_n^1) = W_1^0(-n,n) \cap W_2(-n,n) = \{ f \in W_2(-n,n) \mid f(-n) = f(n) = 0 \}$$

$$\mathbb{H}_n^1 f = -\frac{d^2}{dx^2} f + q f \qquad \text{(derivadas distribucionales)}$$

es inmediato que $\mathbb{H}_n^1 : L2(-n,n) \circlearrowleft$ es simétrico .

ii) Extension con condiciones de frontera tipo Neumann

$$D(\mathbb{H}_n^{(2)}) = \{ f \in W_2(-n,n) \mid \frac{d}{dx} f(\pm n) = 0 \}$$

$$\mathbb{H}^{(2)} f = -\frac{d^2}{dx^2} f + q f \qquad \text{(derivadas distribucionales)}$$

integrando por partes $\langle \mathbb{H}_n^{(2)} f, g \rangle$ se deduce que $\mathbb{H}_n^{(2)}$ es simétrico.

2) Sea $\Omega \subset R^m$ una región acotada con frontera suave. El operador minimal $\mathbb{H}_\Omega^0 : L2(\Omega) \circlearrowleft$ está dado por

$$D(\mathbb{H}_\Omega^0) = C_0^\infty(\Omega) \quad , \quad \mathbb{H}_\Omega^0 f = -\Delta f + q f$$

(donde $q(x)$ es la misma del ejemplo 4). Nuevamente integrando por partes se deduce que $\mathbb{H}_\Omega$ es simétrico. Las extensiones simétricas de $\mathbb{H}_\Omega^0$ con condiciones de frontera tipo Dirichlet y Neumann son respectivamente

i) $$D(\mathbb{H}_\Omega^1) = W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega)$$

$$\mathbb{H}_\Omega^1 f = -\Delta f + q f$$

ii) $$D(\mathbb{H}_\Omega^{(2)}) = \{ f \in W_2(\Omega) \mid \frac{\partial}{\partial n} f(\partial\Omega) = 0 \ , \ \frac{\partial}{\partial n} = \text{derivada normal a } \partial\Omega \}$$

$$\mathbb{H}_\Omega^{(2)} f = -\Delta f + q f \ ;$$

en (i) y (ii) las derivadas son distribucionales.

2. Operadores diferenciales sobre $L2(R^m)$ con coeficientes constantes.

En esta sección mostramos que cada polinomio en R^m induce un operador diferencial con las mismas propiedades.

Definimos el polinomio $p(x)$ en m-variables y grado r como

$$p(x) = \sum_{|\alpha| \le r} c_\alpha x^\alpha \quad , \quad \alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m), \ x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \dots x_m^{\alpha_m}$$

donde almenos un coeficiente c_α con $|\alpha| = r$ es distinto de cero. El operador maximal de multiplicación P es

$$P : L_2(R^m) \circlearrowleft \quad , \quad P f = p(x) f .$$

Teorema (2.3). Sea $F:L2(R^m)\circlearrowleft$ la transformada de Fourier.
a) Cada polinomio induce un operador diferencial T cerrado

$$T = F^{-1} P F : L_2(R^m)\circlearrowleft$$

definido por

$$D(T) = F^{-1} D(P) = \{ f \in L_2(R^m) \mid Ff \in D(P) \}$$

$$Tf = \sum_{|\alpha| \leq r} C_\alpha D^\alpha f \quad , \quad D^\alpha = \prod_{j=1}^{m} \left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}\right)^{\alpha_j}$$

donde las derivadas son distribucionales

b) el adjunto T^* es inducido por P^*

$$T^* = F^{-1} P^* F$$

c) el operador minimal $T_0 : L2(R^m)\circlearrowleft$ dado por

$$D(T_0) = C_0^\infty(R^m) \quad , \quad T_0 f = Tf$$

(las derivadas son clásicas) tiene por cerradura a T: $\overline{T}_0 = T$.

Corolario (2.4). Los siguientes enunciados son equivalentes
i) todos los coeficionetes de p(x) son reales
ii) T es autoadjunto
iii) T_0 es simétrico
iv) T_0 es Esencialmente Autoadjunto.

La prueba del teorema anterior se basa en que la transformada de Fourier no cambia las propiedades de la gráfica G(P), ya que es una isometría, por tanto G(P) y G(T) son cerradas. La propiedad del operador minimal de $T=\overline{T}_0$ se debe a que $(C_0^\infty(R^m), \langle .,.\rangle_T)$ es denso en D(T) en la norma de la gráfica.

Una clase muy importante de operadores diferenciales parciales es el conjunto de operadores elípticos.

Def. El operador T inducido por el polinomio p(x) se llama elíptico si existe una constante $C>0$ tal que

$$1 + |p(x)| \geq C\,(1+|x|^2)^{r/2} \quad \text{para cada } x \in R^m.$$

La elipticidad del operador T es equivalente a pedir que la norma $\|.\|_T$ de la gráfica y la del espacio de Sobolev $(W_r(R^m), \langle .,.\rangle_r)$ sean equivalentes por tanto $D(T) = W_r(R^m)$.

Proposición. Si el operador diferencial T, inducido por el polinomio p(x), es elíptico entonces las normas $\|.\|_T$ y $\|.\|_r$ son equivalentes.

Demostracion. Probaremos que las normas $\|.\|_T$ y $\|.\|_{r,0}$ son equivalentes, donde $\|.\|_{r,0}$ es la norma definida en (II,$2.3) .
a) por hipótesis existe una contante C>0 tal que

$$(1+|x|^2)^{r/2} \leq C\,(1+|p(x)|) \quad , \text{entonces para } f \in L_{2,r}(R^m)$$

$$(1+|x|^2)^r |f|^2 \leq C^2 \left(|f|^2 + 2\,|p| \cdot |f| + |Pf|^2 \right)$$

ahora integrando y usando la desigualdad de Schwarz

$$\langle |P| f, f \rangle \leq \|Pf\| + \|f\|$$

$$\text{queda} \quad \|(1+|x|^2)^{r/2} f\| \leq C \{ \|f\|^2 + \|Pf\|^2 \}^{1/2}$$

147894

y usando la trasformada de Fourier queda

$$\|\hat{f}\|_{r,0} = \|(1+|x|^2)^{r/2} F\hat{f}\| \leq C \{ \|\hat{f}\|^2 + \|T\hat{f}\|^2 \}$$

donde $F\hat{f}=f$ para $\hat{f}\in W_r(R^m)$,

b) Desigualdad inversa. Es claro que existe una constante $C_2>0$ tal que

$$1+|p(x)|\leq C_2^2(1+|x|^2)^{r/2} \quad \text{para cada } x\in R^m, \text{ luego}$$

$$\|f\|^2+\|Pf\|^2\leq C_2^2\,\|(1+|x|^2)^{r/2}f\|^2 \quad \text{implica}$$

$$\|\hat{f}\|_T\leq C_2\|\hat{f}\|_{r,0}\ .$$

Como probamos en (II,$2.3), la norma $\|\cdot\|_{r,0}$ es equivalente a la norma $\|\cdot\|_r$ de $(W_r(R^m),<.,.>_r)$. QED

Corolario. Si T es elíptico entonces $D(T)=W_r(R^m)$.

Hay otra caracterización de operadores elípticos para lo cual introducimos la

Def. Si T es el operador diferencial inducido por el polinomio p(x) la parte principal de P está dada por los terminos se orden (r)

$$P_r=\sum_{|\alpha|=r}C_\alpha X^\alpha$$

y la parte principal de T es

$$T_r=\sum_{|\alpha|=r}C_\alpha D^\alpha.$$

Teorema. Sea p(x) un polinomio de grado (r) y T el operador diferencial inducido por P. Entonces los enunciados siguientes son equivalentes

i) T es elíptico

ii) la parte pricipal de P sólo se anula en x=0; es decir,

$$P_r(x)=0 \quad \text{implica} \quad x=0$$

iii) $D(T)=W_r(R^m)$;
en tal caso las normas $\|.\|_T$ y $\|.\|_r$ son equivalentes.

Ejemplo 6. El operador de momento lineal

1) El operador minimal de momento lineal $\mathbb{P}_0:L2(R)\circlearrowleft$ dado por

$$D(\mathbb{P}_0)=C_0^\infty(R) \quad ; \quad \mathbb{P}_0 f=\frac{1}{i}\frac{d}{dx}f$$

tiene las propiedades siguientes

i) es esencialmente autoadjunto; ya que su cerradura dada por

$$D(\overline{\mathbb{P}}_0)=W_1(R) \quad ; \quad \overline{\mathbb{P}}_0 f=\frac{1}{i}\frac{d}{dx}f \quad \text{(derivada distribucional)}$$

es simétrico y cerrado (Teo. 2.2)

ii) $\overline{\mathbb{P}}_0$ es elíptico

2) El operador minimal de momento lineal $\mathbb{P}_{0,j}:L2(R^m)\circlearrowleft$

$$D(\mathbb{P}_{0,j})=C_0^\infty(R^m)\ ; \quad \mathbb{P}_{0,j} f=\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}f$$

tiene propiedades analógas a las de $\mathbb{P}_0$.

Ejemplo 7. Operador de energía cinética (laplaciano).

El operador minimal de energía cinética $T_0:L2(R^m)\circlearrowleft$

$$D(T_0)=C_0^\infty(R^m)\ , \quad T_0 f=-\Delta f$$

tiene las propiedades siguientes

i) es esencialmente autoadjunto (corolario 2.4); es decir, su cerradura $\overline{T}_0:L2(R^m)\circlearrowleft$ dada por

$$D(\overline{T}_0) = W_2(R^m) \quad , \quad \overline{T}_0 f = -\Delta f \quad \text{(derivadas distribucionales)}$$

es un operador autoadjunto

ii) $\overline{T}_0$ es elíptico.

Nota. La esencial autoadjuntes del operador minimal $T_0 : L2(R^m) \circlearrowleft$

$$D(T_0) = C_0^\infty(R^m) \quad , \quad T_0 f = -\Delta f$$

permanece sin cambio bajo una gran clase de perturbaciones, que incluye a la mayoría de los potenciales en Física, y permite estudiar algunas propiedades de los operadores de Schröedinger en regiones acotadas. La esencial autoadjuntes de T_0 sobre $L2(R^m)$ se pierde en $L2(\Omega)$, donde $\Omega \subset R^m$ es una región acotada con frontera suave, debido a que pueden imponerse distintas condiciones de frontera a los elementos del dominio

$$f(\partial\Omega) = 0 \qquad o \qquad \frac{\partial}{\partial n} f(\partial\Omega) = 0$$

(ver ejemplo 5) lo que conduce a distintas extensiones autoadjuntas del operador minimal

$$D(T_\Omega^0) = C_0^\infty(\Omega) \quad , \quad T_\Omega^0 f = -\Delta f \quad ; \quad T_\Omega^0 : L_2(\Omega) \circlearrowleft .$$

Con el objeto de obtener extensiones autoadjuntas de T_Ω^0 es importante que este operador sea acotado por abajo, propiedad que introducimos en la sección siguiente.

3. Operadores y formas sesquilineales acotados y por abajo

Si un operador $T:H \circlearrowleft$ es simétrico entonces induce la forma sesquilineal densamente definida $t(.,.)$

$$D(t) = D(T) \quad , \quad t(u,v) = \langle Tu; v \rangle$$

que a su vez define la forma cuadrática real-valuada

$$E(u) = t(u,u).$$

Def. El operador simétrico $T:H \circlearrowleft$ se llama acotado por abajo si existe una constante $\lambda \in R$ tal que

$$E(u) \geq \lambda \|u\|^2 \quad \text{para cada} \quad u \in D(T);$$

a la mayor de las λ se le llama cota inferior de T.

La importancia de la acotación por abajo de un operador simétrico consiste en que permite estudiar sus propiedades y obtener extensiones autoadjuntas (extensión de Friedrichs) usando la teoría de formas sesquilineales.

Ejemplo 3 (continuación). Si la función $q:\overline{\Omega} \to R$ es continua y acotada por abajo; es decir, existe una q_0 tal que

$$q(x) \geq q_0 \quad \text{para cada} \quad x \in \overline{\Omega}$$

entonces q_0 es una cota inferior del operador de multiplicación Q ya que

$$|f|^2 q(x) \geq |f|^2 q_0 \quad \text{implica} \quad \langle Qf, f \rangle \geq q_0 \|f\|^2.$$

Ejemplo 4 (continuación).

1) Cuando el potencial q(x) es acotado por abajo por q_0

$$q(x) \geq q_0 \quad \text{para cada} \quad x \in R^m$$

es inmediato que el operador minimal $\mathbb{H}_0$ es acotado por abajo por

q_0, ya que el término $\langle -\Delta f, f\rangle$ siempre es positivo

$$\langle -\Delta f, f\rangle = \langle \nabla f, \nabla f\rangle \quad \text{para} \quad f \in C_0^\infty(R^m)$$

por tanto $\quad |f|^2 q(x) \geq |f|^2 q_0 \quad$ implica

$$\langle \mathbb{H}_0 f, f\rangle \geq q_0 \|f\|^2$$

para cada $f \in C_0^\infty(R^m)$.

2) Si el potencial $q(x)$ es singular , como $-1/r$, puede mostrarse la siguiente

Proposición. Un operado T simétrico es acotado por abajo si y sólo si su espectro es acotado por abajo, en tal caso la cota inferior de T y $\sigma(T)$ es la misma.

Por tanto en casos como el átomo de Hidrógeno, el operador minimal $\mathbb{H}_0$ es acotado por abajo por la energia del estado base.

Ejemplo 5 (continuación).

Como en el ejemplo anterior, la acotación por abajo del potencial $q(x)$ implica la acotación del operador minimal $\mathbb{H}_\Omega^0$.

Si para un potencial $q(x)$ el operador minimal $\mathbb{H}_0$ sobre $C_0^\infty(R^m)$ es acotado por abajo (como en el caso del Átomo de Hidrógeno, ejemplo anterior)

$$\langle \mathbb{H}_0 f, f\rangle \geq \lambda \|f\|^2 \quad \text{para cada} \quad f \in C_0^\infty(R^m)$$

es inmediato que tal propiedad la hereda el operador minimal $\mathbb{H}_\Omega^0$ en $L2(\Omega)$ ya que en particular se cumple

$$\langle \mathbb{H}_\Omega^0 f, f\rangle \geq \lambda \|f\|^2 \quad \text{para cada} \quad f \in C_0^\infty(\Omega) \subset C_0^\infty(R^m).$$

El teorema siguiente da la importancia de los operadores elipticos en relacion a los operadores acotados por abajo (como el laplaciano).

Teorema. Sea $T: L2(R^m) \circlearrowleft$ un operador diferencial elíptico y autoadjunto (o simétrico) con coeficientes constantes y $m>1$. Entonces T es acotado por abajo cuando

$$\lim_{|x| \to +\infty} P(x) = +\infty .$$

El laplaciano es ejemplo típico de operador elíptico y acotado por abajo.

$3. Teoría espectral

1. Conceptos

En el análisis siguiente asumimos que $T: H \circlearrowleft$ es un operador cerrado. Los conceptos de resolvente, conjunto resolvente, espectro etc. son los mismos que para operadores acotados, pero hay unas aclaraciones pertinentes en el caso de operadores cerrados.

Definimos la resolvente como

$$R(z,T) = (z-T)^{-1} \in B(H)$$

lo que automáticamente implica que para cada $z \in \rho(T)$ el operador z-T es inyectivo, acotado y los más importante :

$$\text{Rango}(z-T) = \text{Dominio } R(z,T) = H.$$

Como T es cerrado el operador z-T es cerrado por tanto $(z-T)^{-1}$ también es cerrado (Teo. 1.4), ya que Rango(z-T) es todo H entonces automáticamente es acotado (por teorema de la gráfica cerrada) lo que permite redefinir el conjunto resolvente para operadores cerrados (y acotados) como

$$\rho(T) = \{ z \in \mathbb{C} \mid z-T \text{ es inyectivo y Rango}(z-T) = H \}.$$

Nota. Puede darse el caso de que z-T se inyectivo y $(z-T)^{-1}$ sea acotado por tanto el teorema de la gráfica cerrada indica que Rango(z-T)=D(z-T) es un subespacio cerrado de H pero esto no implica que sea todo el espacio, esta diferencia es lo que distingue a operadores simétricos y autoadjuntos, por un lado y por otro resalta que en el caso de la resolvente su dominio siempre es todo el espacio H.

2. Proyecciones ortogonales y Subespacios invariantes

Cuando un operador $T \in B(H)$ conmuta con una proyección ortogonal P entonces Rango(P) y su complemento ortogonal son subespacios invariantes bajo T , pero en el caso de un operador cerrado y no acotado ya no puede darse la identidad TP=PT ya que D(T) no es todo el espacio (de lo contrario seria acotado según el Teorema de la gráfica cerrada) por tanto a lo más puede ocurrir que $PT \subset TP$

$$D(PT) = \{ f \in D(T) \mid Tf \in D(P) = H \} = D(T)$$

$$D(TP) = \{ f \in D(P) \mid Pf \in D(T) \} ;$$

esto nos lleva a la redefinición de conmutación.

Def. Decimos que el operador $T:H \circlearrowleft$ conmuta con $P \in B(H)$ si

$$PT \subset TP.$$

Ahora mostraremos que la conmutación de T con P nos lleva nuevamente a la descomposición del espacio H en subespacios invariantes bajo T.

Proposición. Sea P una proyección ortogonal sobre H y T un operador cerrado. $PT \subset TP$ si y sólo si $PD(T) \subset D(T)$ y $T\text{Rango}(P) \subset \text{Rango}(P)$.

La prueba es inmediata, con esto podemos "descomponer" a T como sigue : definimos al operador T_P como $D(T_P)=D(T) \cap \text{Rango}(P)$ y $T_P u = Tu$ para cada $u \in D(T_P)$, analógamente se define T_{1-P}. Como T es cerrado entonces T_P y T_{1-P} son cerrados por tanto T escribirse como

$$T = T_P + T_{1-P} \quad , \quad D(T) = D(T_P) + D(T_{1-P}).$$

La decomposición anterior puede generalizarse.

Teorema (3.1). Si el conjunto de proyecciones $\{P_k\}_{k=1}^{m}$ satisface

$$P_k P_l = \delta_{kl} P_k$$

y $P_k T \subset T P_k$ para cada k Entonces el operador cerrado T tiene la descomposición

$$T = T_1 + \ldots + T_m \quad , D(T) = D(T_1) + \ldots + D(T_m)$$

donde

$$D(T_k) = D(T) \cap \mathrm{Rango}(P_k) \quad \text{y} \quad T_k u = Tu \quad \text{para } u \in D(T_k).$$

Otra manera de plantear la descomposición de T es pidiendo que P conmute con la resolvente

$$P R(z,T) = R(z,T) P$$

lo que elimina el problema del dominio ya que $P, R(z,T) \in B(H)$.

Teorema (3.2). Sea $\rho(T) \neq \emptyset$ y $P \in B(H)$.
a) Si $PT \subset TP$ entonces $R(z,T)P = PR(z,T)$ para cada $z \in \rho(T)$
b) Si para alguna $z \in \rho(T)$ se cumple $R(z,T)P = PR(z,T)$ entonces $PT \subset TP$.

3. Resolvente, analiticidad y singularidades

Las identidades de la resolvente son válidas para operadores cerrados, salvo porque debe tenerse cuidado con los dominios.

Teorema (3.3). Sean $S, T : H \circlearrowleft$ cerrados.
a) Primera identidad resolvente: para $z, z' \in \rho(T)$ tenemos

$$\begin{aligned} R(z,T) - R(z',T) &= (z'-z)\, R(z,T)\, R(z',T) \\ &= (z'-z)\, R(z',T)\, R(z,T) \end{aligned}$$

b) Segunda identidad resolvente: para $z \in \rho(T) \cap \rho(S)$ y sobre $D(T) \cap D(S)$

$$\begin{aligned} R(z,T) - R(z,S) &= R(z,T)\,(T-S)\, R(z,S) \\ &= R(z,S)\,(T-S)\, R(z,T). \end{aligned}$$

Consecuencia inmediata de (a) es el

Teorema (3.4). Sea $T : H \circlearrowleft$ cerrado. Entonces
a) si $z_0 \in \rho(T)$ entonces para $z \in D(z_0, \|R(z_0)\|^{-1})$ se cumple

$$R(z,T) = \sum_{n=0}^{\infty} (z_0 - z)^n\, R(z_0, T)^{n+1}$$

b) $\rho(T)$ es abierto y $\sigma(T)$ es cerrado
c) $R(z)$ es analítica sobre $\rho(T)$.

Un cálculo similar al de operadores acotados (II,$5.3) muestra que

$$P = \frac{-1}{2\pi i} \int_\Gamma R(z,T)\, dz \quad , \Gamma = \text{curva cerrada} \subset \rho(T),$$

es una proyección ortogonal : $P^2 = P$ y P es autoadjunto, además como P conmuta con $R(z,T)$ para cada $z \in \rho(T)$ entonces P conmuta con T ($PT \subset TP$) lo que nos lleva al interesante teorema de separación del espectro.

Teorema (3.5). Supongamos que $\sigma(T) = \sigma'(T) \cup \sigma''(T)$ donde $\sigma'(T)$ consta de un número finito de autovalores y la curva rectificable Γ separa a $\sigma'(T)$ de $\sigma''(T)$. Entonces
a) el espacio H tiene la descomposición

$$H = M' \oplus M''$$

donde

$$M' = \text{Rango}(P) \quad , \; P = \frac{-1}{2\pi i}\int_\Gamma R(z,T)\,dz \; , \; M'' = M'^{\perp}$$

b) el operador T admite la descomposición

$$T = T_{M'} + T_{M''} \qquad , \; T_{M'} \in B(M')$$

donde $\sigma(T_{M'})=\sigma'$ y $\sigma(T_{M''})=\sigma''$, y los operadores $T_{M'}$ y $T_{M''}$ están dados por

$$D(T_{M'}) = D(T) \cap M' \quad , \; T_{M'}u = Tu \quad \text{para } u \in D(T_{M'}),$$

análogamente para $T_{M''}$.

4. Espectro y extensiones autoadjuntas de operadores simétricos

Hasta aquí sólo hemos asumido que $T:H\circlearrowleft$ es cerrado, en caso de ser simétrico o autoadjunto hay propiedades adicionales de la resolvente y el espectro.

Como cada operador simétrico es cerrable y su cerradura es un operador simétrico entonces asumiremos que cada operador simétrico es cerrado.

El primer resultado es un criterio adicional sobre conmutación.

Teorema (3.6). Sea T simétrico y $P\in B(H)$ una proyección ortogonal. T conmuta con P ($PT \subset TP$) si y sólo si $u\in D(T)$ implica $Pu\in D(T)$ y TPu está en Rango(P).

Este teorema es útil para definir y caracterizar la suma ortogonal de operadores autoadjuntos.

Ahora comenzamos a estudiar el espectro de operadores simétricos.

Teorema (3.7). Sea $T:H\circlearrowleft$ simétrico y cerrado entonces
a) cada autovalor es real
b) autovectores de distintos autovalores son ortogonales
c) para cada $z\in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$, $(z-T)^{-1}$ está bien definido y es acotado

$$\|(z-T)^{-1}\| \le |\operatorname{Im} z|^{-1}.$$

Demostración. Los incisos (a) y (b) son triviales. Para (c) tomemos $z=x+iy$ en $\mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$ entonces para cada $f\in D(T)$

$$\|(z-T)f\|^2 = \|(x-T)f\|^2 + |y|^2\|f\|^2 \ge |\operatorname{Im} z|^2 \|f\|^2,$$

por tanto $(z-T)f\neq 0$ si $f\neq 0$; es decir, $z-T$ es inyectivo, sea $g=(z-T)f$ entonces

$$\|(z-T)^{-1}g\| \le |\operatorname{Im} z|^{-1} \|g\| . \qquad \text{QED}$$

Observaciones.
a) Del teorema anterior se desprende que $(z-T)^{-1}$ tiene un dominio cerrado; ya que $(z-T)^{-1}$ es cerrado y acotado el teorema de la gráfica cerrada dice que $\text{Rango}(z-T)=D[(z-T)^{-1}]$ es un subespacio cerrado de H.

NO puede concluirse que $\text{Rango}(z-T)=H$; pero por ser cerrado el teorema de proyección da

$$H = \text{Rango}(z-T) \oplus \text{Rango}(z-T)^{\perp}$$

b) Lo anterior da origen al siguiente concepto

$$\text{Indice Defecto} = \operatorname{def}(z-T) = \dim\{\text{Rango}(z-T)^{\perp}\}$$

y este concepto da la diferencia entre un operador simétrico cerrado y un operador autoadjunto como veremos enseguida. La primera propiedad de def(z-T) es :

Proposición. Sea T simétrico cerrado entonces def(z-T) es contante en cada semiplano $\mathrm{Im}(z) \gtrless 0$.

Por tanto basta considerar def($\pm$ i-T).

Teorema. Un operador simétrico cerrado es autoadjunto si y sólo si def($\pm$i-T)=0.

Cuando un operador simétrico cerrado no es autoadjunto es posible establecer cuando tiene extensiones autoadjuntas como establece el

Teorema. Un operador simétrico tiene extensiones autoadjuntas si y sólo si def(i-T)=def(-i-T).

Aquí es donde se aprecia la virtud de que un operador simétrico sea esencialmente autoadjunto (aquel cuya cerradura es un operador autoadjunto) como los operadores diferenciales simétricos sobre $L2(R^m)$ con coeficientes constantes.

Teorema (3.8). Un operador simétrico $T:H \circlearrowleft$ es esencialmente autoadjunto si y sólo si $\overline{T}$ es la única extensión autoadjunta.

Nota. Como veremos en §4.1, la propiedad de esencial autoadjuntes del operador minimal

$$T_0 : L_2(R^m) \circlearrowleft \ , \ D(T_0) = C_0^\infty(R^m) \ , \ T_0 f = -\Delta f$$

se preserva bajo una gran variedad de potenciales que lo perturban , como el potencial coulombiano o x^2 .

Nota. En $L2(\Omega)$ con $\Omega \subset R^m$ región acotada, se pierde la esencial autoadjuntes del operador minimal T_0 debido a que pueden imponerse distintas condiciones de frontera a los elementos del dominio los que lleva a distintas extensiones autoadjuntas del operador minimal T_Ω^0, por esta razón recurrimos a la teoría de formas sesquilineales ya que da el camino más sencillo para obtener extensiones autoadjuntas del operador minimal el cual se basa en el Teorema de Extensión de Friedrichs.

Nota. Para obtener extensiones autoadjuntas del operador minimal en regiones acotadas usaremos varios resultados de la teoría de perturbaciones de operadores diferenciales sobre $L2(R^m)$ con coeficientes constantes, por esta razón seguiremos en la linea de estudiar tales operadores en $L2(R^m)$.

Finalmente daremos algunos resultados concernientes a operadores autoadjuntos.

Teorema Un operador simetrico $T:H \circlearrowleft$ es autoadjunto si y sólo si $\sigma(T) \subset R$.

Teorema. Sea $T:H \circlearrowleft$ autoadjunto entonces los siguientes enunciados son equivalentes

a) $z \in \rho(T)$

b) Rango(z-T)=H

c) existe una $c>0$ tal que $\|(z-T)f\| > c\|f\|$ para cada $f \in D(T)$; es decir $z-T$ es inyectivo y $\|R(z,T)\| < c$.

Ejemplo 3 (continuación).

La caracterización del espectro del operador de multipicación Q es sencilla ya que $z-Q$ es el operador de mutiplicación $z-q(x)$; tal caracterización requiere de la teoría de la medida, por lo que sólo daremos la

Proposicion. Si $\Omega \subseteq R^m$ es abierto y $q(x)$ es continua sobre Ω entonces

$$\sigma(Q) = \overline{\{q(x) \mid x \in \Omega\}} = \text{cerradura del rango de } q(x).$$

Proposicion. $\lambda \in \sigma(Q)$ es un autovalor si y sólo si la imagen inversa

$$q^{-1}(\lambda) = \{x \in \Omega \mid q(x) = \lambda\}$$

es un conjunto de medida positiva.

Un caso particular es

$$D(Q) = L_{2,2}(R^m) , \quad Qf = (\textstyle\sum_{k=1}^{m} x_k^2) f = |x|^2 f$$

cuyo espectro es $\sigma(Q) = [0,+\infty)$ y carece de autovalores.

Ejemplo 4 (continuación).

En $4.4 mostramos que para muchos potenciales como x^2 y $-1/r$ eloperador minimal $\mathbb{H}_0$ es esencialmete autoadjunto, por lo que asumimos que $\mathbb{H}_0$ posee tal propiedad.

Para conocer la resolvente $R(z) = (\mathbb{H}_0 - z)^{-1}$, $z \in \rho(\mathbb{H}_0)$, debemos resolver la ecuación diferencial en $u(x)$

$$(\overline{\mathbb{H}}_0 - z) u = f \qquad \text{para} \quad f \in L_2(R^m)$$

pero como es bien sabido, la solución está dada através de la función de Green $G_z(x,y)$ del operador $\overline{\mathbb{H}}_0 - z$

$$u(x) = (\overline{\mathbb{H}}_0 - z)^{-1} f(x) = \int G_z(x,y) f(y) dy .$$

El operador integral que representa a $R(z)$ es acotado, pertenece a $B(L2(R^m))$, ya que es la resolvente de un operador autoadjunto pero no siempre es compacto; por ejemplo, si $q=-1/r$ (átomo de Hidrógeno) entonces $R(z)$ tiene un espectro CONTINUO por tano NO puede ser un operador compacto (Teo. 6.5-II).

Ejemplo 5 (continuación).

En $5.4 mostramos que los operadores $\mathbb{H}_\Omega^1$ y $\mathbb{H}_\Omega^{(2)}$ son autoadjuntos. Para conocer la resolvente de $\mathbb{H}_\Omega^1$ debemos resolver la ecuación diferencial

$$(\mathbb{H}_\Omega^1 - z) u = f \qquad \text{con } z \in \rho(\mathbb{H}_\Omega^1) \text{ y } f \in L_2(\Omega)$$

sujeta a la condicióne de frontera (problema de Dirichlet)

$$u(\partial\Omega) = 0 .$$

Nuevamente, tal solución se da através de la función de Green

$$u(x) = R(\mathbb{H}_\Omega^1, z) = \int_\Omega G_z(x,y) f(y) dy$$

pero a diferencia del ejemplo anterior, para una gran clase de potenciales (incluidos x^2 y $-1/r$) la resolvente $(\mathbb{H}_\Omega^1 - z)$ es un operador COMPACTO en los espacios $(L2(..), \langle .,. \rangle)$ y $(W_1^{\circ}(\Omega), \langle .,. \rangle_1)$, probar esto es el objetivo del capítulo IV. La gran ventaja de la teoría desarrollada en el capitulo IV es que no se necesita conocer la forma explícita de la resolvente de $\mathbb{H}_{\Omega}^{1}$, basta con probar que $\mathbb{H}_{\Omega}^{1}$ tiene ciertas propiedades que son fáciles de hallar.

Ejemplo 8. Espectro de operadores Diferenciales sobre $L2(R^m)$ con coeficientes constantes.

Si $T:L2(R^m)\circlearrowleft$ es el operador diferencial inducido por el polinomio

$$p(x) = \sum_{|\alpha|\leq r} c_\alpha x^\alpha$$

entonces T y P tienen el mismo espectro :

si $z \in \rho(P)$ entonces $(z-P)^{-1} \in B(L_2(R^m))$ y

$$(z-T)^{-1} = (z - F^{-1}PF)^{-1} = F^{-1}(z-P)^{-1}F$$

por tanto $z\in p(T)$ si y sólo si $z\in p(P)$, por tanto

$$\sigma(T) = \sigma(P) = \overline{\{p(x) \mid x \in R^m\}}$$

y no hay autovalores.

El procedimiento anterior es mejor conocido como método de la transformada de Fourier para resolver la ecuación diferencial no homogénea

$$\left(\sum_\alpha c_\alpha D^\alpha - z\right) u = f \qquad \text{para } f \in L_2(R^m),$$

ya que aplicando F queda

$$\left(F \sum_\alpha c_\alpha D^\alpha F^{-1} - z\right) Fu = Ff$$

$$(P(y) - z)\,\hat{u} = \hat{f}$$

donde se aprecia que $P(y)-z\neq 0$ para cada $y\in R^m$, lo que equivale a pedir que $z\in p(P)$, por tanto

$$\hat{u} = (P(y)-z)^{-1}\hat{f} \longrightarrow u = F\frac{\hat{f}(y)}{P(y)-z} = \int G_z(x,y) f(y)\,dy$$

donde la función de Green está dada por

$$G_z(x,y) = c\int dy' \frac{e^{i(x-y)\cdot y'}}{P(y')-z}, \quad c = \text{constante}.$$

Como caso particular tenemos al laplaciano :

$$T_0 : L_2(R^m)\circlearrowleft, \quad D(T_0) = C_0^\infty(R^m),$$

$$T_0 f = -\Delta f \qquad \text{y}$$

$$\sigma(\overline{T_0}) = [0,+\infty) \quad ; \ \overline{T_0} \text{ carece de autovalores.}$$

$4. Perturbación de Operadores Autoadjuntos

En las secciones $2.2 y $3.4 hemos estudiado algunas propiedades de los operadores diferenciales sobre $L2(R^m)$ con coeficientes constantes de las que destacan :

a) el operador minimal $T_0:L2(R^m)\circlearrowleft$

$$D(T_0) = C_0^\infty(R^m), \quad T_0 f = \sum_{|\alpha|\leq r} c_\alpha D^\alpha f$$

es esencialmete autoadjunto cuando $c_\alpha \in R$.
b) si $T=\overline{T}_0$ es elíptico y simétrico entonces es acotado por abajo
c) $\sigma(T)=\sigma_e(T)$ =cerradura del rango del polinomio $\sum_{|\alpha|\leq r} c_\alpha x^\alpha$ y T carece de autvalores.

En las secciones siguientes haremos una clasificación de los potenciales $q(x):R^m\text{-->}R$ para los cuales el operador T+Q conserva las propiedades citadas; además obtendremos resultados valiosos para estudiar operadores en regiones acotadas.

1. Estabilidad de Autoadjuntes

En esta sección y las dos siguientes estudiamos las perturbaciones Q más sencillas de un operador T: las perturbaciones T-acotadas (ver $1.4).

Teorema (4.1). Sea $T:H\rightleftarrows$ autoadjunto (esencialmente autoadjunto) sobre el espacio de Hilbert H. Si el operador $Q:H\rightleftarrows$ simétrico es T-acotado con T-cota<1 Entonces T+Q es autoadjunto y D(T)=D(T+Q) (T+Q es esencialmente autoadjunto, $\overline{T+Q}=\overline{T}+\overline{Q}$ y $D(\overline{T+Q})=D(\overline{T})$) .

Recordemos que si Q tiene T-cota<1 entonces T+Q es cerrado y el domino es el mismo, pero en caso de que T sea autoadjunto y Q simétrico además T+Q es autoadjunto.

La prueba del teorema es relativamente sencilla ,sólo involucra los conceptos de Adjunto y propiedades de la resolvente.

2. Estabilidad de acotación por abajo

Otra propiedad importante (cuando la tiene) de un operador autoadjunto es la acotación por abajo (ver $2.3).

Una caracterización de la acotación por abajo la da el espectro.

Proposición. Un operador simétrico $T:H\rightleftarrows$ es acotado por abajo con cota λ si y sólo si su espectro esta acotado por abajo por λ. En particular si T es autoadjunto entonces $\min \sigma(T)$ es la cota inferior de T.

Sabemos que la mayoría de los operadores elípticos y simétricos son acotados por abajo, nuevamente tal propiedad se conserva bajo perturbaciones simétricas T-acotadas con T-cota<1.

Teorema (4.2). Sea $T:H\rightleftarrows$ autoadjunto y acotado por abajo con cota γ_T. Si $Q:H\rightleftarrows$ es simétrico, T-acotado con T-cota<1 entonces T+Q es autoadjunto y acotado por abajo. Si en particular se cumple

$$\|Qf\| \leq a\|f\| + b\|Tf\| \quad \text{para cada } f\in D(T)\ ;\ a,b\geq 0 \text{ y } b<1$$

entonces

$$\gamma_{T+Q} = \gamma_T - \max\left\{\frac{a}{1-b}\ ,\ a+b|\gamma_T|\right\}$$

es una cota inferior de T+Q.

3. Espectro Esencial y Perturbaciones Relativamente Compactas

Dentro de la clase de perturbaciones T-acotadas destacan las perturbaciones T-compactas por dejar invariante al espectro esencial.

Def. Sea $T:H_1 \dashrightarrow H_2$ cerrado. El operador $Q:H_1 \dashrightarrow H_2$ se llama T-compacto (o relativamente compacto respecto a T) si es T-acotado y compacto sobre la gráfica de T :

$$\begin{tikzcd} (D(T),\langle\cdot|\cdot\rangle_T) \arrow[dr, "\hat{Q}"] & \\ (D(T)\subset H_1,\langle\cdot|\cdot\rangle_1) \arrow[u, dashed] \arrow[r, "Q"] & (H_2,\langle\cdot|\cdot\rangle_2) \end{tikzcd}$$

$\hat{Q}$ compacto , $\hat{Q}f = Qf$ para $f \in D(T)$.

Una propiedad interesante de los operadores T-compactos es :

Proposición (4.3). Sean $T,Q:H_1 \dashrightarrow H_2$ operadores tales que T es cerrado y Q es T-compacto. Entonces Q tiene T-cota=cero; es decir, para cada $e>0$ existe una $C_e>0$ tal que

$$\|Qf\| \leq C_e \|f\| + e\|Tf\|.$$

Ahora tenemos el importante teorema sobre invariancia del espectro esencial de un operador autoadjunto.

Teorema (4.4). Sea $T:H \circlearrowleft$ autoadjunto, Q simetrico y T-compacto Entonces $\sigma_e(T+Q) = \sigma_e(T)$.

4. El operador de Schröedinger $-\Delta + q$ en $L2(R^m)$. Las familias de potenciales $M_{\rho,loc}(R^m)$ y $M_\rho(R^m)$

En esta sección estudiamos el operador minimal $\mathbb{H}_0:L2(R^m)\circlearrowleft$

$$D(\mathbb{H}_0) = C_0^\infty(R^m) \quad , \quad \mathbb{H}_0 f = -\Delta f + qf$$

para una familia de potenciales q(x) simétricos que incluye potenciales singulares como el Coulomb.

Como sabemos el operador minimal $T_0:L2(R^m)\circlearrowleft$

$$D(T_0) = C_0^\infty(R^m) \quad , \quad T_0 f = -\Delta f$$

tiene las propiedades siguientes
a) es esencialmente autoadjunto , $\bar{T}_0=T$ es autoadjunto
b) $D(T)=W_2(R^m)$
c) T es elíptico y acotado por abajo por el cero.

Como $(W_2(R^m),\langle .,.\rangle_2)$ es la gráfica de T, para mostrar que q(x) es $\bar{T}_0$-acotado basta con probar que

$$Q:(W_2(R^m),\langle\cdot|\cdot\rangle_2) \longrightarrow (L_2(R^m),\langle\cdot|\cdot\rangle)$$

es un mapeo acotado y tiene $\bar{T}_0$-cota<1, para lo cual introduciremos las familias de potenciales $M_{\rho,loc}(R^m)$.

Def. Una función $q:R^m \dashrightarrow R$ se llama localmente de cuadrado integrable si satisface

$$N_q(x) = \left\{ \int_{|y|\leq 1} |q(x-y)|^2 dy \right\}^{1/2} < \infty \quad \text{para cada } x \in R^m$$

Al conjunto de funciones localmente cuadrado integrables le llamamos $L2_{loc}(R^m)$.

Def. A cada función $q:R \dashrightarrow R$ y a cada $p \in R$ les asociamos la funcion

$$M_{q,p}(x) = \begin{cases} \left\{ \int_{|y|\le 1} |q(x-y)|^2 \, |y|^{p-m} dy \right\}^{1/2} & \text{para } p<m \\ N_q(x) & \text{para } p \ge m. \end{cases}$$

Def. Denotamos por $M_{p,loc}(R^m)$ al espacio vectorial de funciones $q(x)$ para las cuales $M_{q,p}(x)$ es una función localmente acotada.

Def. Denotamos por $M_p(R^m)$ al subespacio de $M_{p,loc}(R^m)$ formado por las funciones $q(x)$ para las cuales $M_{q,p}(x)$ es acotada en todo R^m. Si $q(x)$ está en $M_p(R^m)$ definimos

$$M_{q,p} = \sup\{ M_{q,p}(x) \mid x \in R^m \}.$$

De las definiciones es inmediato que si $p_1 \le p_2$ entonces

$$M_{p_1,loc}(R^m) \subset M_{p_2,loc}(R^m) \subset L_{2,loc}(R^m)$$
$$M_{p_1}(R^m) \subset M_{p_2}(R^m).$$

Teorema (4.5). **Asumamos** que $r \in \mathbb{N}$ y $p<2r$ entonces
a) Existe una constante $C_0>0$ tal que

$$\|qf\| \le C_0 M_{q,p} \|f\|_r \quad \text{para cada } q \in M_p(R^m) \text{ y } f \in W_r(R^m)$$

b) Para cada $e>0$ existe una $C_e>0$ tal que

$$\|qf\| \le C_e \|f\| + e\|f\|_r \quad \text{para cada } f \in W_r(R^m).$$

Del teorema anterior se desprende que para cada operador diferencial S de orden r sobre $L2(R^m)$ con coeficientes constantes, el potencial $q(x) \in M_{p<2r}(R^m)$ es una perturbación con S-cota=0, en particular para el laplaciano tenemos el

Corolario. Si $q:R^m \dashrightarrow R$ pertenece a $M_p(R^m)$ con <4 entonces
a) el operador minimal $T_0+Q:L2(R^m) \circlearrowleft$

$$D(T_0+Q) = C_0^\infty(R^m) \quad , \quad (T_0+Q)f = -\Delta f + qf$$

es esencialmente autoadjunto y $D(\overline{T_0+Q}) = W_2(R^m)$.

b) El operador de multiplicación Q inducido por $q(x)$ es $\overline{T}_0$-acotado y tiene $\overline{T}_0$-cota=0; es decir, para cada $\varepsilon>0$ existe una $C_\varepsilon>0$ tal que

$$\|Qf\| = \|qf\| \le C_\varepsilon \|f\| + \varepsilon \|\Delta f\| \quad \text{para } f \in W_2(R^m)$$

c) $\overline{T_0+Q}$ es acotado por abajo.

El siguiente teorema da un criterio para saber cuando Q es $\overline{T}_0$-compacto.

Teorema (4.6). Si $q(x) \in M_{p<4}(R^m)$ y

$$\lim_{|x|\to\infty} N_q(x) = 0$$

Entonces el operador $Q:(W_2(R^m), \langle .,. \rangle_2) \dashrightarrow (L2(R^m), \langle .,. \rangle)$: $Qf=qf$ es compacto.

Ejemplo 9. Al operador minimal $T_0:L2(R) \circlearrowleft$

$$D(T_0) = C_0^\infty(-\infty,\infty) \quad ; \quad T_0 f = -\frac{d^2}{dx^2} f$$

lo perturbamos con el potencial $q(x)=e^{-x^2}$ que tiene las propiedades siguientes :

i) es continuo y acotado sobre $(-\infty,\infty)$, por tanto pertenece a $M_\rho(R)$ para p>0 y tiene T-cota=0

$$\|e^{-x^2}f\| \leq \|f\|$$

ii) es T_0-compacto ya que

$$\lim_{|x|\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-y)^2}dy = 0$$

por tanto el operador minimal $\mathbb{H}_0 : L2(R)\circlearrowleft$

$$D(\mathbb{H}_0) = C_0^\infty(-\infty,\infty)\ ,\quad \mathbb{H}_0 f = -\frac{d^2}{dx^2} f + e^{-x^2} f$$

tiene la propiedades siguientes

a) es esencialmente autoadjuto; es decir, tiene una única extension autoadjuta dada por

$$D(\overline{\mathbb{H}}_0) = W_2(R)\ ,\quad \overline{\mathbb{H}}_0 f = -\frac{d^2}{dx^2} f + e^{-x^2} f$$

donde las derivadas son distribucionales (Teo. 4.1)

b) $\mathbb{H}_0$ es acotado por abajo por 0 (Teo. 4.2)

c) $\sigma_e(\overline{\mathbb{H}}_0) = \sigma_e(\overline{T}_0) = [0,+\infty)$

d) la resolvente de $\overline{\mathbb{H}}_0$ es un operador integral de la forma

$$R(z)f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G_z(x,y) f(y)\,dy$$

R(z) es acotado pero NO es compacto por tener un espectro continuo (Teo. 6.5-II).

Ejemplo 10. Átomo de Hidrógeno.

Al operador minimal de energia cinetica $T_0 : L2(R^m)\circlearrowleft$

$$D(T_0) = C_0^\infty(R^3)\ ,\quad T_0 f = -\Delta f$$

lo perturbamos con el potencial coulombiano

$$q(x) = -|x|^{-1} = -1/r$$

que pertenece a $M_\rho(R^m)$ para p>2 :

i) si p≥3 tenemos

$$M^2_{q,\rho}(x) = \int_{|y|\leq 1} |x-y|^{-2}dy$$

haciendo x=0 (por traslación de ejes llevamos el origen a x)

$$M^2_{q,\rho}(x) = \int_{|y|\leq 1} |y|^{-2}dy = 4\pi\int_0^1 dr\, r^2\, r^{-2} = 4\pi$$

ii) para 2<p<3 , y llevando nuevamente el origen a x tenemos

$$M^2_{q,\rho}(x) = \int_{|y|\leq 1} |y|^{-2}\,|y|^{\rho-3}dy = 4\pi\int_0^1 dr\, r^2 r^{-2} r^{\rho-3} = \frac{4\pi}{\rho-2}\ ;$$

además q(x) es $\overline{T}_0$-compacto (Teo. 4.6) ya que

$$\lim_{|x|\to\infty} \int_{|y|\leq 1} |x-y|^{-2}dy = 0$$

por tanto el operador minimal $\mathbb{H}_0 : L2(R^m)\circlearrowleft$

$$D(\mathbb{H}_0) = C_0^\infty(R^3)\ ,\quad \mathbb{H}_0 f = -\Delta f - \frac{1}{r} f$$

tiene las propiedades siguientes

a) es esencialmente autoadjunto; es decir, el operador $\mathbb{H} : L2(R^m)\circlearrowleft$

$$D(\mathbb{H}) = W_2(R^3)\ ,\quad \mathbb{H} f = -\Delta f - \frac{1}{r} f$$

(derivadas distribucionales) es la única extensión autoadjunta de $\mathbb{H}_0$

b) $\mathbb{H}$ es acotado por abajo (Teo. 4.2)

c) $\sigma_e(\mathbb{H}) = \sigma_e(T) = [0,+\infty)$ (Teo. 4.4); de esto se deduce que si H tiene espectro puntual entonces se localiza abajo de 0 y consta de autovalores aislados con multiplicidad finita, lo que es conocido en Física,

d) La resolvente R(z) de $\mathbb{H}$ es un operador acotado pero NO es compacto por tener un espectro continuo.

Sabemos que hay casos como el potencial x^2 que no están en alguna familia $M_\rho(R^m)$, pero hay criterios adicionales que garantizan la esencial autoadjuntes del operador minimal T_0+Q sobre $C_0^\infty(R^m)$ uno de los cuales damos a continuación.

Teorema (4.7). Si el potencial $q(x):R^m \to R$ pertenece a $M_{\rho,loc}(R^m)$ para alguna $\rho<4$ y tiene la forma $q=q_1+q_2$ donde

$$q_1 \in M_\rho(R^m)$$

$$q_2(x) \geq -C|x|^2 \text{ para alguna } C\geq 0 \text{ y toda } x\in R^m$$

Entonces el operador minimal

$$D(\mathbb{H}_0)=C_0^\infty(R^m) \quad , \quad \mathbb{H}_0 f=-\Delta f+qf$$

es esencialmente autoadjunto sobre $L2(R^m)$.

La demostración del teorema anterior consiste en probar directamente que los índices defecto del operador minimal son cero (§3.4).

Nota. Para nuestros propósitios es irrelevante conocer el dominio exacto de la cerradura del operador minimal T_0+Q, basta con saber que es esencialmente autoadjunto sobre $C_0^\infty(R^m)$.

Ejemplo 11.
1) El oscilador armonico. El potencial x^2 satisface las hipótesis del Teo. (4.7) por tanto el operador minimal

$$\mathbb{H}_0 : L_2(R) \circlearrowleft \; ; \; D(\mathbb{H}_0)=C_0^\infty(R) \; , \; \mathbb{H}_0 f=-\frac{d^2}{dx^2}f+x^2 f$$

es esencialmente autoadjunto y tiene las propiedades siguientes
a) es acotado por abajo por el cero
b) sólo tiene espectro discreto; es decir, $\sigma_e(\mathbb{H}_0)=\emptyset$.

2) Potencial de Mitra. Perturbamos el operador $\mathbb{H}_0$ del oscilador armónico con el potencial

$$q(x)=\lambda\left(\frac{x^2}{1+x^2}-1\right) \quad , \quad \lambda>0$$

que pertenece a $M_{\rho>0}(R)$ y es $\mathbb{H}_0$-compacto, por tanto el operador

$$D(S)=C_0^\infty(R) \quad ; \quad Sf=\mathbb{H}_0 f+q(x)f$$

tiene las propiedades siguientes
a) es esencialmente autoadjunto (Teo. 4.1)
b) es acotado por abajo (Teo. 4.2)
c) sólo tiene espectro puntual y cada autovalor tiene multiplicidad finita, ya que $\sigma_e(\mathbb{H}_0)=\sigma_e(\mathbb{H}_0+Q)=\emptyset$ (Teo. 4.4).

---

§5. Operadores de Schrödinger en regiones acotadas

En esta sección abordamos el problema de obtener extensiones autoadjuntas del operador minimal

$$\mathbb{H}_\Omega^0 : L_2(\Omega)\circlearrowleft \quad ; \quad D(\mathbb{H}_\Omega^0)=C_0^\infty(\Omega) \quad , \quad \mathbb{H}_\Omega^0 f=-\Delta f+qf$$

donde $\Omega\subset R^m$ es una región acotada con frontera suave. Como vimos en la sección anterior el operador minimal $T=-\Delta$ sobre $C_0^\infty(R^m)$ es esencialmente autoadjunto en $L2(R^m)$ lo que implica que tiene una única extensión autoadjunta que es precisamente su cerradura; la dificultad para obtener extensiones autoadjuntas en regiones acotadas $L2(\Omega)$ se debe a que hay una gran variedad de condiciones de frontera que pueden imponerse a los elementos del dominio (como en el ejemplo 5), mientras que en L2(R^m) la única condición de frontera

$$\lim_{|x|\to\infty} f(x) = 0$$

se satisface automáticamente al pedir que $f(x) \in L2(R^m)$.

Para obtener extensiones autoadjuntas del operador minimal en L2(Ω) recurrimos a la teoría de formas sesquilineales, que da un método de fácil aplicación. La idea es análoga a la de llevar un operador cerrado a su gráfica para estudiar sus propiedades, el operador minimal T_0 define una forma $t(.,.)$ la cual induce un producto interior $<.,.>_t$ (análogo al producto interior $<.,.>_T$ de la gráfica G(T)) lo que hace de $(D(T),<.,.>_t)$ un pre-espacio de Hilbert cuya complesión define una extensión $\bar{t}(.,.)$ de la forma $t(.,.)$ con la cual puede mostrarse que existe una extensión autoadjunta en L2(Ω) del operador minimal (Teorema de extensión de Friedrichs).

1. Formas sesquilineales y operadores acotados por abajo. Cerradura de una forma sequilineal.

El operador laplaciano $T_0 : L2(R^m) \circlearrowleft$

$$D(T_0) = C_0^\infty(R^m) \quad , \quad T_0 f = -\Delta f$$

es acotado por abajo por el cero; en particular, la restricción $T_\Omega^0 : L2(\Omega) \circlearrowleft$ $\quad D(T_\Omega^0) = C_0^\infty(\Omega) \quad , \quad T_\Omega^0 f = -\Delta f$

es acotada por abajo e induce la forma

$$D(t_\Omega) = D(T_\Omega^0) \quad , \quad t_\Omega(u,v) = \langle T_\Omega^0 u, v\rangle = \langle \nabla u, \nabla v\rangle$$

que es densamente definida, simétrica y acotada por abajo sobre L2(Ω).

La forma $t_\Omega(.,.)$ define sobre $D(T_\Omega^0)$ el producto interior

$$\langle f,g\rangle_t = t_\Omega(f,g) - \alpha \langle f,g\rangle \quad , \alpha < 0$$

lo que hace de $(D(t_\Omega),<.,.>_t)$ un pre-espacio de Hilbert cuya complesión es $(W_1^0(\Omega),<.,.>_{\bar{t}})$.

Proposición (5.1). La complesión de $(D(t_\Omega),<.,.>_t)$ es el espacio $(W_1^0(\Omega),<.,.>_{\bar{t}})$ donde la forma $\bar{t}_\Omega(.,.)$ se define como sigue

a) para $u,v \in W_1^0(\Omega)$ existen $\{u_n\},\{v_n\} \subset C_0^\infty(\Omega)$ tales que

$$\bar{t}_\Omega(u,v) = \lim t_\Omega(u_n, v_n)$$

b) $\bar{t}_\Omega(.,.)$ es densamente definida, simétrica y acotada por abajo

c) el producto interior $<.,.>_{\bar{t}}$ es

$$\langle f|g\rangle_{\bar{t}} = \bar{t}_\Omega(f,g) - \alpha\langle f,g\rangle \quad , \alpha < 0.$$

Demostración.
a) si tomamos $\alpha = -1$ entonces

$$\langle u|v\rangle_1 = \langle u|v\rangle_{\bar{t}} \quad \text{para } u,v \in C_0^\infty(\Omega)$$

y por definición la complesión de $(C_0^\infty(\Omega),<.,.>_1)$ es precisamente el espacio de Hilbert $(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$.
b) para $\alpha<0$ no hay cambio ya que

$$\langle u|v\rangle_1 = \langle u|v\rangle_t + (1+\alpha)\langle u|v\rangle \quad \text{para } u,v \in C_0^\infty(\Omega)$$

por tanto $\langle .,. \rangle_1$ y $\langle .,. \rangle_t$ inducen normas equivalentes.

La forma $\bar{t}_\Omega(.,.)$ dada por

$$D(\bar{t}_\Omega) = W_1^0(\Omega) \quad , \quad \bar{t}_\Omega(u,v) = \langle \nabla u | \nabla v \rangle$$

(las derivadas son distribucionales), es la CERRADURA de $t_\Omega(.,.)$ (ver I,\$4.2), ya que

$$D(\bar{t}_\Omega) \supset D(t_\Omega) \quad \text{y} \quad t_\Omega(u,v) = \bar{t}_\Omega(u,v) \quad \text{para } u,v \in D(t_\Omega)$$

por tanto $\bar{t}_\Omega(.,.)$ es una extensión de $t_\Omega(.,.)$ $(\bar{t}_\Omega \supset t_\Omega)$.

Es claro que $\bar{t}_\Omega(.,.)$ no es acotada en $L2(\Omega)$ ya que la induce un operador no acotado (en II,\$7.1 mostramos la reciprocidad entre formas y operadores acotados), pero como en el caso de un operador cerrado sobre su gráfica, la forma $\bar{t}_\Omega(.,.)$ es acotada sobre su "gráfica" $(W_1^0(\Omega), \langle .,. \rangle_{\bar{t}})$; el siguiente diagrama muestra las analogias entre operadores cerrados y formas cerradas :

$$\begin{tikzcd}
(D(T), \langle \cdot | \cdot \rangle_T) \arrow[dr, "\hat{T} \text{ acotado}"] & \\
(D(T) \subset H, \langle \cdot | \cdot \rangle) \arrow[u, dashed] \arrow[r, "T"', "\text{cerrado}"] & (H, \langle \cdot | \cdot \rangle)
\end{tikzcd}
\qquad
\begin{tikzcd}
(D(\bar{t}), \langle \cdot | \cdot \rangle_{\bar{t}}) \arrow[dr, "\hat{t} \text{ acotada}"] & \\
(D(\bar{t}) \subset H, \langle \cdot | \cdot \rangle) \arrow[u, dashed] \arrow[r, "\bar{t}"', "\text{cerrada}"] & \mathbb{C}
\end{tikzcd}$$

$$\langle f | g \rangle_T = \langle f | g \rangle + \langle Tf | Tg \rangle \qquad \langle f | g \rangle_{\bar{t}} = \bar{t}(f,g) - \alpha \langle f | g \rangle$$

$(D(T), \langle \cdot | \cdot \rangle_T)$ es un espacio de Hilbert $\qquad (D(\bar{t}), \langle \cdot | \cdot \rangle_{\bar{t}})$ es un espacio de Hilbert.

2. Acotación relativa de formas y operadores

Denotamos por $Q: L2(\Omega) \circlearrowleft$ al operador de multiplicacion inducido por $q(x)$. Recordemos que la forma $\langle Qu,u \rangle$ está relativamente acotada por la forma asociada al laplaciano $t_\Omega(.,.)$ si existen $a,b>0$ tales que

$$|\langle Qu | u \rangle| \leq a\|u\|^2 + b\,\bar{t}_\Omega(u,u) \quad \text{para cada } u \in D(\bar{t}_\Omega)$$

y al ínfimo de las b le llamamos $\bar{t}_\Omega$-cota de $\langle Qu,u \rangle$ (I,\$4.2).

En general no hay una conección entre la acotación relativa de dos operadores y las formas que inducen, pero en el caso de operadores simétricos y autoadjuntos la acotación relativa de operadores implica la acotación relativa de las respectivas formas sesquilineales.

Teorema (5.2). Sea $T: L2(\Omega) \circlearrowleft$ autoadjunto y positivo, Q simétrico y con T-cota<1 :

$$\|Qu\| \leq C\|u\| + b\,\|Tu\| \quad \text{para } u \in D(T) \text{ y } 0 \leq b < 1$$

Entonces la forma $\langle Qu,u \rangle$ está acotada por $\langle Tu,u \rangle$ con cota relativa<b; es decir, existen $a, b' > 0$ tales que

$$|\langle Qu,u \rangle| \leq a\|u\|^2 + b' \langle Tu,u \rangle \quad \text{para } u \in D(T) \text{ y } b' \leq b.$$

En nuestro problema hay dos casos en los que se puede establecer la acotación de $\langle Qu,u \rangle$ por $\bar{t}_\Omega(u,u) = \langle \nabla u, \nabla u \rangle$.

Proposición (5.3). Si $q: \Omega \to R$ es continua sobre $\bar{\Omega}$ entonces

a) $Q: L2(\Omega) \circlearrowleft$ es acotado

$$\|Qf\| \leq \max_{\bar{\Omega}} |q(x)| \cdot \|f\| \quad \text{para cada } f \in L_2(\Omega)$$

b) Q tiene T_Ω^0-cota=0

c) $\langle Qu,u\rangle$ tiene $\bar{t}_\Omega$-cota=0 (Teo. 5.2)

$$|\langle Qu,u\rangle| \leq \max_{\Omega} |q(x)| \cdot \|u\|^2.$$

Nótese que la proposición (5.3) incluye casos como x^2 que no pertenecen a alguna familia $M_\rho(R^m)$, pero que en regiones acotadas son bien comportados.

Para potenciales singulares como el de Coulomb tenemos lo siguiente. Si $q(x) \in M_\rho(R^m)$ para alguna $\rho<4$ entonces

a) para cada $\varepsilon>0$ existe una $C_\varepsilon>0$ tal que

$$\|Qf\| = \|qf\| \leq C_\varepsilon \|f\| + \varepsilon \|\Delta f\| \quad \text{para cada } f \in W_2(R^m)$$

esto da la acotación relativa de operadores

b) en particular sobre $C_0^\infty(\Omega)$ tenemos

$$\|Qf\| \leq C_\varepsilon \|f\| + \varepsilon \|\Delta f\|$$

de lo cual se deduce la acotación de las respectivas formas según Teo. (5.2)

$$|\langle Qf, f\rangle| \leq C_\varepsilon \|f\|^2 + \varepsilon \bar{t}_\Omega(f,f) \quad \text{para cada } f \in C_0^\infty(\Omega)$$

y por densidad de $C_0^\infty(\Omega)$ en $(W_1^0(\Omega), \langle .,.\rangle_{\bar{t}})$ tenemos

$$|\langle Qf, f\rangle| \leq C_\varepsilon \|f\|^2 + \varepsilon \bar{t}_\Omega(f,f) \quad \text{para cada } f \in W_1^0(\Omega)$$

por tanto $\langle Qu,u\rangle$ tiene $\bar{t}_\Omega$-cota=0 .

Teorema (5.4). Si $q(x) \in M_\rho(R^m)$ para alguna $\rho<4$; $\Omega \subset R^m$ es una región abierta, conexa, acotada y con frontera suave entonces

i) $D(\bar{t}_\Omega) = D(\bar{t}_\Omega + \langle Q.,.\rangle) = W_1^0(\Omega)$,

ii) para cada cada $\varepsilon>0$ existe una $C_\varepsilon>0$ tal que

$$|\langle Qf, f\rangle| \leq C_\varepsilon \|f\|^2 + \varepsilon \bar{t}_\Omega(f,f) \quad \text{para cada } f \in W_1^0(\Omega),$$

donde $\bar{t}_\Omega(.,.)$ es la forma inducida por el laplaciano T_Ω^0.

Ejemplo 10 (continuación).

El operador minimal $T_\Omega^0 : L2(\Omega) \circlearrowleft$,

$$D(T_\Omega^0) = C_0^\infty(\Omega) \quad , \quad T_\Omega^0 f = -\Delta f$$

induce la forma

$$D(t_\Omega) = D(T_\Omega^0) \quad , \quad t_\Omega(u,v) = \langle \nabla u, \nabla v\rangle$$

que tiene por cerradura a

$$D(\bar{t}_\Omega) = W_1^0(\Omega) \quad , \quad \bar{t}_\Omega(u,v) = \langle \nabla u | \nabla v\rangle.$$

Como el potencial $-1/r$ pertenece a $M_{\rho<4}(R^m)$ entonces la forma $\langle Qf,f\rangle$ está acotada por $\bar{t}_\Omega(.,.)$ con $\bar{t}_\Omega$-cota=0 según Teo. (5.4); es decir, para cada $\varepsilon>0$ existe una $C_\varepsilon>0$ tal que

$$|\langle -1/r\, u | u\rangle| \leq C_\varepsilon \|u\|^2 + \varepsilon \langle \nabla u | \nabla u\rangle \quad \text{para cada } u \in W_1^0(\Omega).$$

Ejemplo 11 (continuación).

El operador minimal $T_n^0 : L2(-n,n) \circlearrowleft$ $(n \in \mathbb{N})$

$$D(T_n^0) = C_0^\infty(-n,n) \quad , \quad T_n^0 f = -\frac{d^2}{dx^2} f$$

induce la forma cerrada

$$D(\bar{t}_n) = W_1^0(-n,n) \quad , \quad \bar{t}_n(u,v) = \left\langle \frac{du}{dx} \Big| \frac{dv}{dx} \right\rangle.$$

Como el potencial x^2 es acotado en $[-n,n]$ entonces la forma $\langle Qf,f\rangle$ está acotada por $\bar{t}_n(.,.)$ con $\bar{t}_n$-cota=0 según Prop. (5.3).

3. Perturbación de formas cerradas

Como en el caso de perturbación de operadores, la acotación relativa de formas permite dar criterios de estabilidad de la cerradura y acotación por abajo de una forma sesquilineal.

Teorema (5.5). Sea $\bar{t}_{\Omega}(.,.)$ la forma inducida por el laplaciano (cerrada y acotada por abajo) y $\langle Qu,u\rangle$ una forma con $\bar{t}_{\Omega}$-cota<1. Entonces la forma

$$h_{\Omega}(u,v) = \langle Qu|v\rangle + \langle \nabla u, \nabla v\rangle$$

tiene las propiedades siguientes

a) es simétrica y acotada por abajo

b) $D(\bar{t}_{\Omega}) = D(h_{\Omega}) = W_1^{\circ}(\Omega)$

c) $h_{\Omega}(.,.)$ es acotada en la norma $\|\cdot\|_1$ de $(W_1^{\circ}(\Omega), \langle .,. \rangle_1)$; es decir, existe una constante K>0 tal que

$$|h_{\Omega}(u,v)| \leq K \|u\|_1 \; \|v\|_1 \quad \text{para } u,v \in W_1^{\circ}(\Omega)$$

d) $h_{\Omega}(.,.)$ es cerrada; es decir, induce un producto interior $\langle .,. \rangle_h$ con el cual $(W_1^{\circ}(\Omega), \langle .,. \rangle_h)$ es un espacio de Hilbert

e) $C_0^{\infty}(\Omega)$ es denso en $(W_1^{\circ}(\Omega), \langle .,. \rangle_h)$.

Es claro que la forma $h_{\Omega}(.,.)$ es inducida por el operador minimal simétrico $\mathbb{H}_{\Omega}^{\circ}: L2(\Omega) \circlearrowleft$

$$D(\mathbb{H}_{\Omega}^{\circ}) = C_0^{\infty}(\Omega) \;, \quad \mathbb{H}_{\Omega}^{\circ} f = -\Delta f + q f$$

y satisface

$$h_{\Omega}(u,v) = \langle \mathbb{H}_{\Omega}^{\circ} u, v\rangle \quad \text{para } u \in D(\mathbb{H}_{\Omega}^{\circ}) \text{ y } v \in W_1^{\circ}(\Omega).$$

4. Extensión de Friedrichs

Ya tenemos todos los ingredientes para obtener una extensión autoadjunta del operador minimal $\mathbb{H}_{\Omega}^{\circ}$.

Teorema (5.6), Extensión de Friedrichs. Sea s(.,.) una forma sesquilineal densamente definida sobre $L2(\Omega)$, simétrica, cerrada y acotada por abajo. Entonces existe un operador autoadjunto T sobre $L2(\Omega)$ tal que

a) $D(T) \subset D(s)$ y $s(u,v) = \langle Tu,v\rangle$ para $u \in D(T)$ y $v \in D(s)$

b) D(T) es denso en D(s) con la métrica inducida por $\langle .,. \rangle_s$

c) si $u \in D(s)$, $w \in L2(\Omega)$ y se cumple

$$s(u,v) = \langle w|v\rangle \quad \text{para cada } v \in D(s)$$

entonces $u \in D(T)$ y $Tu = w$.

Aplicando el teorema anterior a la forma

$$D(h_{\Omega}) = W_1^{\circ}(\Omega) \quad , \quad h_{\Omega}(u,v) = \langle Qu,v\rangle + \langle \nabla u, \nabla v\rangle$$

definida en Teo. (5.5) tenemos el siguiente

Corolario (5.7). Existe un operador autoadjunto $\mathbb{H}_{\Omega}^{1}: L2(\Omega) \circlearrowleft$ inducido por la forma $h_{\Omega}(.,.)$ de Teo. (5.5) que satisface :

a) $D(\mathbb{H}_{\Omega}^{1}) \subset W_1^{\circ}(\Omega)$ y

$$h_\Omega(u,v) = \langle \mathbb{H}^1_\Omega u, v\rangle \quad \text{para } u\in D(\mathbb{H}^1_\Omega) \text{ y } v\in W^0_1(\Omega)$$

b) $\mathbb{H}^0_\Omega u = \mathbb{H}^1_\Omega u$ para cada $u\in C^\infty_0(\Omega)$ ($\mathbb{H}^1_\Omega \supset \mathbb{H}^0_\Omega$)

c) si $u\in W^0_1(\Omega)\cap W_2(\Omega)$, tenemos integrando por partes

$$h_\Omega(u,v) = \langle(-\Delta+q)u,v\rangle \qquad \text{para cada } v\in W^0_1(\Omega)$$

por tanto $W^0_1(\Omega)\cap W_2(\Omega)\subset D(\mathbb{H}^1_\Omega)$ y

$$\mathbb{H}^1_\Omega u = -\Delta u + q u$$

donde las derivadas son distribucionales (en el capítulo IV probamos que $D(\mathbb{H}^1_\Omega)=W^0_1(\Omega)\cap W_2(\Omega)$).

Nota. El Teorema de extensión de Friedrichs sólo afirma la existencia de $\mathbb{H}^1_\Omega$, no da el dominio exacto ni la forma del operador, para obtener esta información y otras propiedades como la compacidad de la resolvente de $\mathbb{H}^1_\Omega$ recurrimos a la teoría de ecuaciones diferenciales con valores en la frontera basada en la teoría de formas sesquilineales (Capítulo IV).

Nota. Deacuerdo el teorema anterior, cada forma s(.,.) induce un operador T autoadjunto, esto permite introducir distintas condiciones de frontera, por ejemplo si la forma es

$$D(s)=W_1(\Omega) \quad , \quad s(u,v)=\langle\nabla u,\nabla v\rangle+\langle qu,v\rangle+\int_{\partial\Omega} u^* v\, d\tau$$

puede mostrarse que el operador autoadjunto respectivo es

$$D(\mathbb{H}^{(2)}_\Omega)=\left\{u\in W_2(\Omega) \;\middle|\; \frac{\partial u}{\partial n}-u=0 \text{ sobre } \partial\Omega\right\}$$

$$\mathbb{H}^{(2)}_\Omega = -\Delta u + q u \qquad \text{(derivadas distribucionales)}$$

donde se observa como se heredan las condiciones de frontera de la forma s(.,.).

\$1. El operador de Schroedinger $\mathbb{H}_\Omega$ sobre $L2(\Omega)$

---

1. Introducción

En el presente capítulo $\Omega \subset R^m$ es una region conexa, abierta, acotada y con frontera suave. El objetivo es mostrar que el operador autoadjunto $\mathbb{H}_\Omega$ sobre $L2(\Omega)$ definido por la forma

$$D(h_\Omega) = W_1^\circ(\Omega) \quad , \quad h_\Omega(u,v) = \langle \nabla u, \nabla v\rangle + \langle qu, v\rangle$$

através del Teo. (5.6)-III (extensión de Friedrichs) , tiene resolvente $(\mathbb{H}_\Omega - z)^{-1}$ compacta en $(L2(\Omega), \langle .,.\rangle)$ y $(W_1^\circ(\Omega), \langle .,.\rangle_1)$, por lo que el método de proyecciones (Bubnov-Galerkin o de Ritz) converge al espectro y funciones propias del problema

$$\mathbb{H}_\Omega u = \lambda u \quad , \quad u(\partial\Omega) = 0 .$$

La hipótesis fundamental que asumiremos en todo el capítulo es que el potencial $q: R^m \to R$ pertenece a la familia $M_{\rho,loc}(R^m)$ para alguna $\rho<4$, por lo cual induce una forma $\langle Qu,u\rangle$ acotada por $\langle \nabla u, \nabla u\rangle$ con cota relativa cero; es decir, para cada $\varepsilon>0$ existe una $C_\varepsilon>0$ tal que

$$(1.1) \qquad |\langle Qu,u\rangle| \leq C_\varepsilon \|u\|^2 + \varepsilon \langle \nabla u, \nabla u\rangle \quad \text{para cada } u \in W_1^\circ(\Omega).$$

Nota. Como solo interesa el comportamiento de $q(x)$ en $\Omega \subset R^m$ (acotada) es suficiente que $q(x) \in M_{\rho,loc}(R^m)$ ya que redefiniendo a $q(x)$ como

$$\hat{q}(x) = \begin{cases} q(x) & x \in \overline{\Omega} \\ 0 & x \notin \overline{\Omega} \end{cases}$$

tenemos $\hat{q}(x) \in M_\rho(R^m)$ y con esta trabajamos en $L2(\Omega)$.

En la seccion \$1.2 definimos la forma $h_\Omega(.,.)$ que estudiaremos en el transcurso del capitulo e induce al operador $\mathbb{H}_\Omega$. En \$2 introducimos la teoría de problemas con valores en la frontera basada en el concepto de solución débil con el fin de obtener los elementos que permitan caracterizar al operador resolvente $R_\Omega(z)$ asociado a $\mathbb{H}_\Omega$. En \$3 mostramos que la resolvente $R_\Omega(z)$ es un operador compacto sobre $L2(\Omega)$, lo que resuelve el problema de existencia de soluciones de $\mathbb{H}_\Omega u = \lambda u$, además mostraremos que las funciones propias de $\mathbb{H}_\Omega$ son funciones infinitamente diferenciables en el sentido clásico. En \$4 damos otra version de la compacidad de la resolvente en el espacio $(W_1^\circ(\Omega), \langle .,.\rangle_1)$ lo que ofrece algunas ventajas numericas. Finalmente en \$5 mostramos que el espectro y funciones propias de todo operador compacto y autoadjunto como la resolvente $R_\Omega(z)$ pueden calcularse diagonalizando matrices finitas.

2. El operador minimal $\mathbb{H}_\Omega^\circ$, la forma $h_\Omega(.,.)$ y el operador $\mathbb{H}_\Omega$

Apartir de (1.1) en III-\$5.3 (Teo. 5.5) probamos que la forma

$$(1.2) \qquad D(h_\Omega) = W_1^\circ(\Omega) \quad , \quad h_\Omega(u,v) = \langle \nabla u, \nabla v\rangle + \langle qu, v\rangle$$

(derivadas distribucionales) tiene las propiedades siguientes

(1.3) i) es simétrica y acotada por abajo por alguna $\lambda_0 \in R$

ii) es cerrada; es decir, induce el producto interior

$$\langle f,g\rangle_h = h_\Omega(f,g) - \alpha\langle f,g\rangle \quad , \alpha < \lambda_0$$

con el cual $(W_1^\circ(\Omega),\langle .,.\rangle_h)$ es un espacio de Hilbert

iii) es acotada en la norma $\|.\|_1$: existe una K>0 tal que

$$|h_\Omega(u,v)| \leq K \; \|u\|_1 \; \|v\|_1 \qquad \text{para} \quad u,v \in W_1^\circ(\Omega)$$

iv) $C_0^\infty(\Omega)$ es denso en $(W_1^\circ(\Omega),\langle .,.\rangle_h)$.

El operador minimal $\mathbb{H}_\Omega^\circ : L2(\Omega) \circlearrowleft$

$$D(\mathbb{H}_\Omega^\circ) = C_0^\infty(\Omega) \quad , \quad \mathbb{H}_\Omega^\circ f = -\Delta f + q f$$

es simétrico y acotado por abajo por $\lambda_0 \in R$.

(1.4) El operador $\mathbb{H}_\Omega : L2(\Omega) \circlearrowleft$ denota la extensión de Friedrichs del operador minimal $\mathbb{H}_\Omega^\circ$(corolario 5.7-III) y tiene las propiedades siguientes

(1.5) i) $D(\mathbb{H}_\Omega) \subset D(h_\Omega) = W_1^\circ(\Omega)$,

$$h_\Omega(u,v) = \langle \mathbb{H}_\Omega u, v\rangle \quad \text{para } u \in D(\mathbb{H}_\Omega) \text{ y } v \in W_1^\circ(\Omega)$$

ii) si $u \in W_1^\circ(\Omega)$, $w \in L2(\Omega)$ y se cumple

$$h_\Omega(u,v) = \langle w, v\rangle \qquad \text{para cada} \quad v \in W_1^\circ(\Omega)$$

entonces $u \in D(\mathbb{H}_\Omega)$ y $w = \mathbb{H}_\Omega u$,

iii) $\mathbb{H}_\Omega$ es acotado por abajo por λ_0 (cota inferior de h_Ω)

iv) $W_1^\circ(\Omega) \cap W_2(\Omega) \subset D(\mathbb{H}_\Omega)$ y

$$\mathbb{H}_\Omega f = -\Delta f + q f \qquad \text{para cada } f \in W_1^\circ(\Omega) \cap W_2(\Omega),$$

donde las derivadas son distribucionales.

El operador $\mathbb{H}_\Omega$ descrito arriba gobierna la dinámica de un sistema cuántico confinado en Ω. Este operador es acotado por abajo y autoadjunto en $L2(\Omega)$ pero no es acotado en la norma de operadores; sin embargo, veremos que su resolvente $R_\Omega(z) = (\mathbb{H}_\Omega - z)^{-1}$ es un operador compacto en $L2(\Omega)$.

Nota. El teorema de extensión de Friedrichs sólo afirma que el operador $\mathbb{H}_\Omega$ existe y da algunas de sus propiedades, pero no dice cual es su dominio $D(\mathbb{H}_\Omega)$ y la forma explícita de $\mathbb{H}_\Omega$, en la siguiente sección desarrollamos la teoría de problemas con valores en la frontera y veremos que $\mathbb{H}_\Omega$ es precisamente la forma diferencial $-\Delta + q$ cuyo dominio es $W_1^\circ(\Omega) \cap W_2(\Omega)$.

---

§2. Teoría de problemas con valores en la frontera basada en el concepto de solución débil

---

1. El operador $\mathbb{H}_\Omega$, la forma h_Ω y el concepto de solución débil

La resolvente $R_\Omega(b) = (\mathbb{H}_\Omega - b)^{-1}$ asociada al operador $\mathbb{H}_\Omega$ es un operador autoadjunto y acotado, pero para mostrar que es un operador compacto sobre $(L2(\Omega),\langle .,.\rangle)$ debemos estudiar la ecuación

$$(2.1) \qquad (\mathbb{H}_\Omega - b)\, u = f$$

donde $b \in \rho(\mathbb{H}_\Omega)$ (conjunto resolvente $\mathbb{H}_\Omega$), $f(x) \in L2(\Omega)$ y $u(x) \in D(\mathbb{H}_\Omega)$. La ecuación (2.1) tiene la dificultad de que no conocemos el dominio $D(\mathbb{H}_\Omega)$ del operador $\mathbb{H}_\Omega$ y la forma explícita de (2.1) para un elemento arbitrario de $D(\mathbb{H}_\Omega)$, ya que el Teo. (5.6)-III sólo afirma la existencia del conjunto $D(\mathbb{H}_\Omega) \subset W_1^\circ(\Omega)$ sobre el cual $\mathbb{H}_\Omega$ es autoadjunto en $L2(\Omega)$.

El concepto de Solución Débil. Para cada $u \in C_0^\infty(\Omega)$ el operador $\mathbb{H}_\Omega$ se reduce al operador minimal $\mathbb{H}_\Omega^\circ$, entonces supongamos que para $f(x) \in L2(\Omega)$ y $b \in \rho(\mathbb{H}_\Omega)$ existe una solución $u(x) \in C_0^\infty(\Omega)$ de (2.1): satisface

$$(2.2) \qquad (-\Delta + q - b)u = f \quad ;$$

a tal $u(x)$ le llamamos solución clásica de (2.1), ya que posee derivadas en el sentido clásico. Si (2.2) se cumple, entonces tambien se satisface

$$\langle(-\Delta+q-b)u, v\rangle = \langle f, v\rangle \quad \text{para cada } v \in W_1^\circ(\Omega)$$

o integrando por partes

$$(2.3) \qquad h_\Omega(u,v) - b\langle u,v\rangle = \langle f,v\rangle \quad \text{para cada } v \in W_1^\circ(\Omega).$$

En otras palabras, cada solución clásica $u(x) \in W_1^\circ(\Omega)$ de (2.1) satisface (2.3).

Ahora invirtamos el planteamiento: para $f(x) \in L2(\Omega)$ y $b \in \rho(H\ )$ hallemos una $u(x) \in W_1^\circ(\Omega)$ que satisfaga (2.3) para cada $v(x) \in W_1^\circ(\Omega)$, es claro que no toda $u(x)$ que cumpla (2.3) es una solución clásica de (2.2) o de (2.1) ya que para satisfacer (2.3) sólo se necesita que $u(x)$ tenga primeras derivadas distribucionales que pertenezcan a $L2(\Omega)$, pero resolver (2.3) en $W_1^\circ(\Omega)$ tiene la ventaja de que conocemos explícitamente la ecuación a resolver (2.3) y si probamos que tal solución 'débil' es más regular ($u(x)$ posee derivadas distribucionales de mayor orden en $L2(\Omega)$) entonces integrando por partes podemos recuperar la ecuación (2.1) o (2.2) por lo que $u(x)$ es la solución buscada a (2.1) o (2.2).

Nótese que por este camino, resolviendo (2.3) y dando la regularidad de la solución débil hallamos el dominio $D(\mathbb{H}_\Omega)$ y determinamos la forma explícita del operador $\mathbb{H}_\Omega$, además obtendremos los resultados que permiten probar la compacidad de la resolvente $R_\Omega(b)$ en $L2(\Omega)$.

Def (2.1),preliminar. Sea $f(x) \in L2(\Omega)$, $b \in \rho(\mathbb{H}_\Omega)$, $h_\Omega(.,.)$ la forma (1.2) y $\mathbb{H}_\Omega$ el operador (1.4). La función $u(x) \in W_1^\circ(\Omega)$ es una solución débil de la ecuación

$$(2.4) \qquad (\mathbb{H}_\Omega - b)u = f$$

si satisface

$$(2.5) \qquad h_\Omega(u,v) - b\langle u,v\rangle = \langle f,v\rangle \quad \text{para cada } v \in W_1^\circ(\Omega).$$

2. El problema de Dirichlet en forma débil

En la definición de solución débil a (2.4), al pedir que $u(x) \in W_1^\circ(\Omega)$ queda implícito que $u(x)$ satisface la condición de frontera

$$(2.6) \qquad u(\partial\Omega) = 0$$

ya que por ser $W_1^\circ(\Omega)$ complesión de $C_0^\infty(\Omega)$ en la métrica inducida por $\langle .,.\rangle_1$ cada elemento de $W_1^\circ(\Omega)$ satisface (2.6) en el sentido de trazas (ver I,$2.3). Como pueden plantearse condiciones de frontera más complicadas (en el problema de Neumann se pide que la derivada normal de cada solución débil se anule en la frontera) daremos una definición que menciona explícitamente la condición de frontera (2.6) (problema de Dirichlet).

Def (2.2). Problema de Dirichlet en forma débil. Sea $f(x)\in L2(\Omega)$, $b\in\rho(\mathbb{H}_\Omega)$, $h_\Omega(.,.)$ la forma (1.2) y $\mathbb{H}_\Omega$ el operador (1.4). La función $u(x)\in W_1^\circ(\Omega)$ se llama solución débil a la ecuación

$$(2.7) \qquad (\mathbb{H}_\Omega - b)\,u = f$$

con la condicion de frontera $u(\partial\Omega)=0$ si satisface

$$(2.8) \qquad h_\Omega(u,v) - b\langle u,v\rangle = \langle f,v\rangle \quad \text{para cada } v\in W_1^\circ(\Omega).$$

Ejemplo 1. Oscilador armónico. Para $f(x)\in L2(-n,n)$ y $b\in\rho(\mathbb{H}_\Omega)$, la ecuación en $u(x)$ con condición de frontera

$$(\mathbb{H}_\Omega - b)\,u = f \quad , \quad u(-n) = u(n) = 0 ,$$

tiene asociado el problema de Dirichlet en forma débil que consiste en hallar $u(x)\in W_1^\circ(-n,n)$ tal que se cumpla para cada $v(x)\in W$ (-n,n) la ecuación

$$\int_{-n}^{n} \left\{ \frac{du^*}{dx}\frac{dv}{dx} + (x^2-b)\, u^* v\right\} dx = \int_{-n}^{n} f^* v\, dx .$$

Ejemplo 4. Átomo de Hidrógeno. El problema de Dirichlet en forma débil asociado a la ecuación en $u(x)$, para $f(x)\in L2(\Omega)$ y $b\in\rho(\mathbb{H}_\Omega)$ dados,

$$(\mathbb{H}_\Omega - b)\,u = f \quad , \quad u(\partial\Omega) = 0 \quad , \Omega\in R^3 ,$$

es la ecuación

$$\int_\Omega \left\{\nabla u^*\cdot\nabla v - \left(\tfrac{1}{r}+b\right) u^* v\right\} dx = \int_\Omega f^* v\, dx ,$$

que debe debe satisfacer $u(x)\in W_1^\circ(\Omega)$ para cada $v(x)\in W_1^\circ(\Omega)$.

En la sección siguiente mostraremos que es fácil probar la existencia y unicidad de la solución débil.

3. Teorema de Lax-Milgram. Existencia y unicidad de soluciones debiles

El teorema de Lax-Milgram es la clave para probar la existencia y unicidad del problema de Dirichlet.

Teorema (Lax-Milgram). Si para la forma h(.,.) definida sobre el espacio de Hilbert $(W_1^\circ(\Omega),\langle.,.\rangle_1)$ existen contantes $K,\alpha>0$ de manera que se cumplen para cada par $u(x),v(x)\in(W\in(\Omega),\langle.,.\rangle_1)$

a) $|h(u,v)| \le k\,\|u\|_1\|v\|_1$ (la forma h(.,.) es acotada)

b) $h(u,u) \ge \alpha\,\|u\|_1^2$ (la forma h(.,.) es elíptica)

Entonces para cada funcional F acotado sobre $(W_1^\circ(\Omega),\langle.,.\rangle_1)$ existe un único elemento $u(x)\in W_1^\circ(\Omega)$ con el cual F puede expresarse como

$$F(v) = h(u,v)$$

para cada $v(x)\in W_1^\circ(\Omega)$, y además satisface la desigualdad

$$\|u\|_1 \leq \frac{1}{\alpha} \|F\|$$

donde $\|F\|$ es la norma de funcional F.

En nuestro caso la forma $h_\Omega(.,.)$ (1.2) es acotada en $(W_1^\circ(\Omega),<.,.>_1)$ propiedad (1.3, iv), pero es menos obvio que satisfaga la hipótesis de elipticidad; esto nos lleva a definir una nueva familia de formas sesquilineales.

Def (2.3). Una forma $h(.,.)$ es coerciva sobre $(W_1^\circ(\Omega),<.,.>_1)$ si existen $\alpha>0$ y $\beta\in R$ con las cuales se cumple

$$h(u,u) \geq \alpha\|u\|_1^2 - \beta\|u\|^2 \qquad \text{para cada } u\in W_1^\circ(\Omega)$$

y se llama estrictamente coerciva (o elíptica) si $\beta=0$.

Cuando la forma inducida por un operador T es elíptica a dicho operador se la llama elíptico.

Los siguientes son algunos ejemplos de que en la mayoria de los casos de interés físico los potenciales inducen formas elípticas.

Ejemplo 1 (continuación).

La elipticidad es inmediata :

$$\langle x^2 f|f\rangle \geq 0 \quad \text{implica} \quad h_\Omega(f,f) = \langle \tfrac{df}{dx}, \tfrac{df}{dx}\rangle + \langle x^2 f, f\rangle \geq \|\tfrac{df}{dx}\|^2,$$

$$h_\Omega(f,f) - b\langle f,f\rangle \geq \|\tfrac{df}{dx}\|^2 - b\|f\|^2 \geq \alpha\|f\|_1^2$$

donde $b<0$ y $\alpha=\min\{1,-b\}$.

Ejemplo 2 (continuación).

Usamos la estimación (1.1). Tomando $0<\varepsilon<1$ existe una $C_\varepsilon>0$ tal que

$$|\langle Qu,u\rangle| \leq C_\varepsilon\|u\|^2 + \varepsilon\|\nabla u\|^2 \longrightarrow 0 \leq \langle Qu,u\rangle + C_\varepsilon\|u\|^2 + \varepsilon\|\nabla u\|^2 \rightarrow$$

$$(1-\varepsilon)\|\nabla u\|^2 \leq h_\Omega(u,u) + C_\varepsilon\|u\|^2 \rightarrow$$

$$(1-\varepsilon)\|\nabla u\|_1^2 \leq h_\Omega(u,u) - (\varepsilon-1-C_\varepsilon)\langle u,u\rangle \;;\; \alpha = 1-\varepsilon \;\text{ y }\; b = \varepsilon-1-C_\varepsilon .$$

El último ejemplo muestra otra cualidad de las familias de potenciales $M_{\rho<4}(R\ )$ y $M_{\rho,loc}(R^m)$: la estimación (1.1) implica la elipticidad de la forma $h_\Omega(.,.)$ en $(W_1^\circ(\ \ ),<.,.>_1)$.

Teorema (2.1). Para los potenciales $q(x)$ que satisfacen

$$|\langle qu,u\rangle| \leq C_\varepsilon\|u\|^2 + \varepsilon\|\nabla u\|^2 \qquad, 0<\varepsilon<1, \text{ para cada } u\in W_1^\circ(\Omega)$$

la forma $h_\Omega(.,.)$ (1.2) es acotada y coerciva.

La demostración es idéntica a la del ejemplo 2.

Ahora podemos probar la existencia y unicidad de la solución débil al problema de Dirichlet (def 2.2).

Teorema (2.2). Si el potencial $q(x)$ satisface (1.1) la forma $h_\Omega(.,.)$ (1.2) tiene las propiedades siguientes :

existen constantes $K,\alpha>0$ y $b\in R$ para las cuales h_Ω-b satisface

i) $|h_\Omega(u,v)| \leq K\|u\|_1\|v\|_1$

ii) $h_\Omega(u,u)-b\langle u,u\rangle \geq \alpha \|u\|_1^2$ para $u,v\in W_1^\circ(\Omega)$

Entonces para cada $f(x)\in L2(\Omega)$ existe una única solución débil $u(x)\in W_1^\circ(\Omega)$ de la ecuación

$$(\mathbb{H}_\Omega - b)u = f \qquad , \qquad u(\partial\Omega)=0$$

que satisface

$$h_\Omega(u,v) - b\langle u,v\rangle = \langle f,v\rangle \quad \text{para cada } v\in W_1^\circ(\Omega),$$

y además cumple la desigualdad

$$\|u\|_1 \leq C\,\|f\|$$

donde $\|\cdot\|_1$ es la norma de $(W_1^\circ(\Omega),\langle.,.\rangle_1)$ y $\|.\|$ es la norma de $(L2(\Omega),\langle.,.\rangle)$, con $C = 1/\alpha$.

Demostración

1) Sobre $(W_1^\circ(\Omega),\langle.,.\rangle_1)$ definimos el funcional F asociado a $f(x)\in L2(\Omega)$

$$F(v) = \langle f,v\rangle \quad \text{para cada } v\in W_1^\circ(\Omega),$$

el cual es acotado sobre $(W_1^\circ(\Omega),\langle.,.\rangle_1)$ ya que

$$|F(v)| \leq \|f\|\cdot\|v\| \leq \|F\|\cdot\|v\|_1$$

donde $\|F\| = \|f\|$ según el Teorema de Riez,

2) Ahora aplicamos el Teo. de Lax-Milgram a F y h_Ω-b. Ya que h_Ω-b satisface para un par $K,\alpha>0$ (Teo. 2.1)

a) $$|h_\Omega(u,v) - b\langle u,v\rangle| \leq K\,\|u\|_1\,\|v\|_1$$

b) $$h_\Omega(u,u) - b\langle u,u\rangle \geq \alpha\,\|u\|_1^2$$

el Teo. de Lax-Milgram afirma que existe una única $u(x)\in W_1^\circ(\Omega)$ asociada a F que satisface

$$F(v) = h_\Omega(u,v) - b\langle u,v\rangle = \langle f,v\rangle \quad \text{para cada } f\in W_1^\circ(\Omega)$$

y esta es precisamente la ecuación (2.8) que define a la solución débil del problema de Dirichlet; además

$$\|u\|_1 \leq \left(\tfrac{1}{\alpha}\right)\|f\|.$$

Nota. El teorema anterior da otro significado a la constante b : es aquella con la cual la forma h_Ω-b es elíptica.

El siguiente paso es mostrar que la solución débil u(x) del problema de Dirichlet (Def. 2.2) tiene la regularidad necesaria para determinar

a) El dominio del operador $\mathbb{H}_\Omega$

b) La resolvente $R_\Omega(b)$ es un operador compacto.

4. Regularidad de la solución débil

Para estudiar el potencial q(x) en regiones acotadas es suficiente pedir que $q(x)\in M_{p,loc}(R^m)$ para alguna p<4, ya que puede considerarse a q(x) como cero fuera de Ω, con esto puede mostrarse el teorema siguiente.

Teorema (2.3). Asumamos que el potencial $q(x)$ pertenece a $M_\rho(R^m)$ para alguna $\rho<4$ (y por tanto satisface 1.1) y sea $h_\Omega(.,.)$ la forma (1.2).

Si $f(x)\in W_k(\Omega)$, para alguna $k=0,1,2$ ..., entonces existe una única solución débil al problema de Dirichlet

$$(\mathbb{H}_\Omega - b)\, u = f \qquad , \qquad u(\partial\Omega) = 0$$

que satisface

1) $h_\Omega(u,v)-b\langle u,v\rangle=\langle f,v\rangle$ para cada $v\in W_1^\circ(\Omega)$

2) $u(x)\in W_1^\circ(\Omega)\cap W_{k+2}(\Omega)$.

Nota. Cada elemento $f(x)\in W_k(\Omega)$ es un elemento de $L2(\Omega)$ cuyas derivadas distribucionales de orden$\leq k$ pertenecen a $L2(\Omega)$. En particular si $f(x)\in C^\infty(\overline{\Omega})$, como $C^\infty(\overline{\Omega})=\bigcap_{k=0}^{\infty} W_k(\Omega)$, entonces $u(x)\in C_0^\infty(\overline{\Omega})$ y por tanto es una solución clasica del problema de Dirichlet.

Nota. Como afirma el Teo.(5.6)-III, el dominio $D(\mathbb{H}_\Omega)$ del operador $\mathbb{H}_\Omega$ es un subconjunto de $W_1^\circ(\Omega)$ por lo cual los elementos de $D(\mathbb{H}_\Omega)$ no necesitan ser soluciones clásicas de (2.1), basta que pertenezcan a $W_1^\circ(\Omega)\cap W_2(\Omega)$ para que pertenezcan a $D(\mathbb{H}_\Omega)$ como veremos en la sección siguiente.

\$3. Compacidad de la resolvente $R_\Omega(b)$ en $L2(\Omega)$ y la solución de $\mathbb{H}_\Omega u(x)=\lambda\, u(x)$

Hagamos un resumen de los resultados obtenidos. Si el potencial $q(x):R^m\text{--->}R$ pertenece a $M_{\rho,loc}(R^m)$ para $\rho<4$ entonces :

1) la forma $h_\Omega(.,.)$

$$(3.1) \qquad D(h_\Omega)=W_1^\circ(\Omega), \quad h_\Omega(u,v)=\langle\nabla u,\nabla v\rangle+\langle qu,v\rangle$$

es simétrica,acotada por abajo, cerrada, acotada y elíptica en $(W_1^\circ(\ \ ),\langle.,.\rangle_1)$

2) para cada $f\in L2(\Omega)$ existe una única solución débil a

$$(3.2) \qquad (\mathbb{H}_\Omega - b)u=f \quad ,u(\partial\Omega)=0 \quad y \quad b\in\rho(\mathbb{H}_\Omega),$$

que satisface

$$(3.3) \qquad h_\Omega(u,v)-b\langle u,v\rangle=\langle f,v\rangle \qquad \text{para cada } v\in W_1^\circ(\Omega)$$

$$(3.4) \qquad \|u\|_1 \leq C\|f\|$$

3) por regularidad, si $f\in W_k(\Omega)$ entonces $u\in W_1^\circ(\Omega)\cap W_{k+2}(\Omega)$, en particular si $f\in L2(\Omega)$ tenemos $u\in W_1^\circ(\Omega)\cap W_2(\Omega)$.

El operador $S(b):(L2(\Omega),\langle.,.\rangle)\text{-->}(W_1^\circ(\Omega),\langle.,.\rangle_1)$.

La primera consecuencia del teorema (2.2) de existencia y unicidad de la solución debil es la existencia del operador acotado

$$(3.5) \qquad S(b):(L_2(\Omega),\langle.,.\rangle)\longrightarrow(W_1^\circ(\Omega),\langle.|.\rangle_1): f\longrightarrow u=S(b)f$$

que asocia a cada $f(x) \in L2(\Omega)$ la solución débil $u(x) \in W_1^\circ(\quad)$ del problema de Dirichlet (3.2).

Proposición (3.1). El operador $S(b)$ (3.5) que asocia a cada $f(x) \in L2(\Omega)$ en (3.2) con la solución débil $u(x) \in W_1^\circ(\Omega)$ tiene las propiedades siguientes :

i) es lineal (por linealidad de 3.3)
ii) es acotado (de (3.4) tenemos $\|u\|_1 = \|S(b)f\|_1 \leq C \|f\|$)
iii) es inyectivo ($S(b)f=0$ implica $f=0$)
iv) $\text{Rango}(S)=\{u \in W_1^\circ(\Omega) \mid u(x)$ es una solución débil de (3.2) para alguna $f \in L2(\Omega)\}$.

De (iii) se deduce que la inversa $S(b)^{-1}$ está bien definida .

Inclusión compacta de $(W_1^\circ(\Omega), \langle .,. \rangle_1)$ en $(L2(\Omega), \langle .,. \rangle)$.

El conjunto $W_1^\circ(\Omega)$ provisto del producto interior $\langle .,. \rangle_1$ es un espacio de Hilbert; sin embargo cada elemeto de $W_1^\circ(\Omega)$ está incluido en $L2(\Omega)$. Ya que la norma $\|.\|_1$ es más fuerte que la de $L2(\Omega)$

$$\|u\|_1 = \{ \|u\|^2 + \|\nabla u\|_1^2 \}^{1/2} < \infty \quad \text{para} \quad u \in W_1^\circ(\Omega)$$

entonces $u(x) \in L2(\Omega)$; además

$$\|u\| \leq \|u\|_1 ,$$

lo que permite definir el operador inclusión

$$(3.6) \qquad In : (W_1^\circ(\Omega), \langle .,. \rangle_1) \longrightarrow (L_2(\Omega), \langle .,. \rangle) : u \longrightarrow In\, u = u$$

que identifica a cada elemento de $(W_1^\circ(\Omega), \langle .,. \rangle_1)$ como un elemento de $(L2(\Omega), \langle .,. \rangle)$.

Proposición (3.2). El operador inclusión In (3.6) que identifica a cada elemento $u(x) \in (W_1^\circ(\Omega), \langle .,. \rangle_1)$ como un elemento de $(L2(\Omega), \langle .,. \rangle)$ tiene las propiedades siguientes

i) es lineal y acotado
ii) es inyectivo
iii) ES COMPACTO .

Nota. Las dos primeras propiedades son evidentes y validas para una region Ω acotada o no, pero la COMPACIDAD depende exclusivamente de la acotación de Ω y no se cumple en regiones NO acotadas, de lo contrario simplemente no existirian operadores de Schröedinger $-\Delta + q$ con espectro continuo.

El operador resolvente $R_\Omega(b)$: $L2(\Omega) \circlearrowleft$.

Tenemos dos operadores

$$S(b) : (L2(\Omega), \langle .,. \rangle) \dashrightarrow (W_1^\circ(\Omega), \langle .,. \rangle_1) \quad \text{y}$$

$$In \;:\; (W_1^\circ(\Omega), \langle .,. \rangle_1) \dashrightarrow (L2(\Omega), \langle .,. \rangle) \quad ;$$

$\text{Rango}(S(b)) = W_1^\circ(\Omega)$ está en el dominio de In por tanto podemos definir la composición que llamamos $R_\Omega(b) = In\,S(b)$ y mostraremos que es precisamente la resolvente de $\mathbb{H}_\Omega$.

Teorema (3.1). El operador $R_\Omega(b)$ definido como

$$R_\Omega(b) = In\, S(b) : (L_2(\Omega), \langle .,.\rangle) \circlearrowleft$$

tiene las propiedades siguientes

i) es lineal y acotado sobre $(L2(\Omega), \langle .,.\rangle)$

ii) es inyectivo y $R_\Omega(b)^{-1} = S(b)^{-1} In^{-1}$

iii) es COMPACTO sobre $(L2(\Omega), \langle .,.\rangle)$ (por Teo. (6.2a)-II)

iv) siendo $h_\Omega(.,.)$ la forma (3.1) tenemos que para cada $f(x) \in L2(\Omega)$ se cumple

$$h_\Omega(R_\Omega(b)f, v) - b\langle R_\Omega(b)f, v\rangle = \langle f, v\rangle \quad \text{para cada } v \in W_1^0(\Omega).$$

La prueba de que $R_\Omega(b) = (\mathbb{H}_\Omega - b)^{-1}$ la haremos en dos partes. En la primera mostramos Rango de $R_\Omega(b) = W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega)$ y en la segunda $D(\mathbb{H}_\Omega) = W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega)$.

Proposición (3.3). Rango de $R_\Omega(b) = W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega)$.

Demostración

1) Rango $R_\Omega(b) \subset W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega)$. Para $f \in L2(\Omega)$, $u = R_\Omega(b)f$ pertenece a $W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega)$ por regularidad de la solución débil a (3.2).

2) $W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega) \subset$ Rango $R_\Omega(b)$. Si $u \in W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega)$ entoces $f = (-\Delta + q - b)u$ pertenece a $L2(\Omega)$ y satisface (integrando por partes)

$$\langle (-\Delta + q - b)u \mid v\rangle = h_\Omega(u, v) - b\langle u, v\rangle = \langle f, v\rangle$$

para cada $v \in W_1^0(\Omega)$, esto prueba que $u(x)$ es solución débil de (3.2) y por tanto esta en el rango de $R_\Omega(b)$ (Teo. (3.1)-iv). QED

En la siguiente proposicion usamos las propiedades (1.5) de $\mathbb{H}_\Omega$.

Proposición (3.4). Para el operador $\mathbb{H}_\Omega$ (1.4) inducido por la forma $h_\Omega(.,.)$ (3.1) se cumple

$$D(\mathbb{H}_\Omega) = W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega).$$

Demostración.

La inclusión $W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega)$ es la propiedad (1.5)-iv de $\mathbb{H}_\Omega$. Falta propar que

$$D(\mathbb{H}_\Omega) \subset W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega).$$

Si $u \in D(\mathbb{H}_\Omega)$ entonces $(\mathbb{H}_\Omega - b)u = f \in L2(\quad)$; además se cumple

$$h_\Omega(u, v) - b\langle u, v\rangle = \langle f, v\rangle \quad \text{para cada } v \in W_1^0(\Omega),$$

según propiedad (1.5)-i , esto define a $u(x)$ como solución débil a (3.2) para la $f(x)$ dada por tanto el teorema de regularidad afirma que $u(x) \in W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega)$. QED

De las pruebas de las dos proposiciones anteriores es inmediato el

Corolario (3.1). Para los operadores $R_\Omega(b)$ y $\mathbb{H}_\Omega$ tenemos

1) $D(\mathbb{H}_\Omega)$ = Rango de R (b) = $W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega)$
2) $R_\Omega(b) = (\mathbb{H}_\Omega - b)^{-1}$.

Solución de $\mathbb{H}_\Omega u = \lambda u$ en $L2(\Omega)$.

Del corolario (3.1) se deduce que

1) Como $D(\mathbb{H}_\Omega) = W_1^0(\Omega) \cap W_2(\Omega)$ entonces $\mathbb{H}_\Omega$ es la forma diferencial

$\mathbb{H}_\Omega f = -\Delta f + q(x) f$, para cada $f \in D(\mathbb{H}_\Omega)$

donde las derivadas son distribucionales,

2) Siendo $\mathbb{H}_\Omega$ autoadjunto en $L2(\Omega)$ su resolvente $R_\Omega(b) = (\mathbb{H}_\Omega - b)^{-1}$ es un operador autoadjunto y compacto sobre $L2(\Omega)$.

3) Las funciones propias de $\mathbb{H}_\Omega$ son las mismas que las de $R_\Omega(b)$, el espectro de $\mathbb{H}_\Omega - b$ es el recíproco de $R_\Omega(b)$

$$(\mathbb{H}_\Omega - b) u = \lambda u \quad \text{si y sólo si} \quad R_\Omega(b) u = \frac{1}{\lambda} u ,$$

por tanto el teorema espectral para operadores compactos y autoadjuntos resuelve el problema $R_\Omega(b)\ u = \lambda' u$.

Teorema (3.2). Siendo compacto y autoadjunto sobre $L2(\Omega)$ el operador resolvente $R_\Omega(b)$ del corolario (3.1) tenemos :

i) El espectro de $R_\Omega(b)$ es puramente discreto , acotado y el cero es el único punto de acumulación.

ii) Cada autovalor es de multiplicidad finita.

iii) Usando el teorema de regularidad tenemos que si $u(x)$ es una función propia entonces $u(x) \in C^\infty(\bar{\Omega})$ y además satisface la condición de frontera $u(\partial\Omega)=0$.

Corolario (3.2). El espectro del operador $\mathbb{H}_\Omega$ es puramente discreto, cada autovalor es de multiplicidad finita y las funciones propias pertenecen a $C^\infty(\bar{\Omega})$; $\sigma(\mathbb{H}_\Omega)$ no tiene puntos de acumulación .

Ejemplo . Para el potencial cero $q(x)=0$ el operador $\mathbb{H}_\Omega$ es

$$D(\mathbb{H}_\Omega) = \{ f \in W_2(-n,n) \mid f(-n) = f(n) = 0 \} \quad ; \quad \mathbb{H}_\Omega f = -\frac{d^2}{dx^2} f ;$$

ecuación de autovalores

$$-\frac{d^2}{dx^2} u = \lambda u \quad , \quad u(-n) = u(n) = 0$$

tiene la solución

1) espectro $\lambda_k = k^2 \pi^2 / 4 n^2$, $k = 1, 2, \ldots$

2) funciones propias

$$u_{2k} = \operatorname{sen} \frac{\pi k}{n} x \qquad \text{para } \lambda_{2k}$$
$$u_{2k+1} = \cos \frac{2k+1}{2k} \pi x \qquad \text{para } \lambda_{2k+1} .$$

$4. El problema $\mathbb{H}_\Omega u = \lambda u$ en $(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$

Otra formulación interesante del problema de autovalores del operador $\mathbb{H}_\Omega$ consiste en definir una restricción de la resolvente ahora como un operador sobre $(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$.

1) El operador $S(b):(L2(\Omega),<.,.>)\text{--->}(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$ asocia a cada $f\in L2(\Omega)$ con la solución débil del problema de Dirichlet

2) La inclusión compacta $In:(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)\text{--->}(L2(\Omega)),<.,.>)$ identifica a cada elemento de $(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$ como un elemento de $(L2(\Omega),<.,.>)$.

3) Ahora efectuamos la composición

(4.1) $\quad R_\Omega^{(1)}(b)=S(b)In:(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)\text{--->}(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$.

Formalmente $R_\Omega(b)$ y $R_\Omega^{(1)}(b)$ son operadores distintos ya que actuan en espacios distintos $(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$ y $(L2(\Omega),<.,.>)$, pero podemos decir que $R_\Omega^{(1)}(b)\subset R_\Omega(b)$, aunque no sea exacto, ya que $D(R_\Omega^{(1)}(b))\subset D(R_\Omega(b))$ y $R_\Omega^{(1)}(b)u=R_\Omega(b)u$ para cada $u\in W_1^0(\Omega)$.

Siguiendo las mismas ideas de las demostraciones de las proposiciones (3.3) y (3.4) tenemos el

Teorema (4.1). El operador $R_\Omega^{(1)}(b)$ (4.1) tiene las propiedades siguientes :

1) es compacto y autoadjunto sobre $(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$

2) el espectro de $R_\Omega^{(1)}(b)$ es el recíproco de $\mathbb{H}_\Omega$-b y tienen las mismas funciones propias.

La ventaja de plantear el problema $\mathbb{H}_\Omega u=\lambda u$ en $(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$ usando el operador $R_\Omega^{(1)}(b)$ consiste en que al trabajar numericamente en dicho espacio la norma inducida por $<.,.>_1$ garantiza tanto la convergencia en el cuadrado de las funciones como de sus derivadas de las mismas lo que puede conducir a una convergencia más rápida.

Solo queda por mostrar que podemos calcular numericamente el espectro y funciones propias del operador $\mathbb{H}_\Omega$ con la presición deseada.

$5. Solución numérica de $\mathbb{H}_\Omega u = \lambda u$

En las secciones $1-4 hemos mostrado que si el potencial q(x) pertenece a $M_{\rho,loc}(R^m)$ para alguna $\rho<4$, $\mathbb{H}_\Omega$ tiene una resolvente compacta ya sea en $(L2(\Omega),<.,.>)$ o en $(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$. Ahora daremos un método numérico de implementación computacional sencilla para calcular el espectro y funciones propias de $\mathbb{H}_\Omega$ con la precisión deseada.

Def (5.1). El operador T sobre $(H,<.,.>)$. Ya que la resolvente del operador $\mathbb{H}_\Omega$ es compacta y autoadjunta en cualquiera de los espacios separables de Hilbert $(L2(\Omega),<.,.>)$ o $(W_1^0(\Omega),<.,.>_1)$, en esta sección asumiremos que T representa a dicha resolvente por lo que es un operador compacto y autoadjunto sobre el espacio separable de Hilbert $(H,<.,.>)$, que puede ser $L2(\Omega)$ o $W_1^0(\Omega)$.

Como estamos interesados en calcular el espectro de $\mathbb{H}_\Omega$ si λ es un autovalor de $\mathbb{H}_\Omega - b$ y T la resolvente mencionada arriba entonces

$$(5.0) \qquad (\mathbb{H}_\Omega - b)\, u = \lambda\, u \quad \text{si y sólo si} \quad \lambda T u = u$$

por lo cual al referirnos a λ como un autovalor de T pensamos que se trata del escalar que satisface la ecuacion $\lambda T\, u = u$.

Convención. El espectro del operador T es el conjunto de escalares que satisfacen (5.0) y por tanto consiste de puntos aislados en el eje real que no tienen puntos de acumulación.

1. El método de Proyecciones (Bubnov-Galerkin o de Ritz)

El metodo de proyecciones para resolver la ecuación

$$(5.1) \qquad \lambda T u = u$$

consiste en proyectar (5.1) en un espacio de dimensión finita, lo que transforma (5.1) en una ecuación matricial; entonces al aumentar la dimensión del espacio de proyección el espectro y funciones propias de cada matriz finita converge a las soluciones de (5.1) en la norma de $(H,<.,.>)$.

Las proyecciones $\mathbb{P}_N$. Siendo $(H,<.,.>)$ separable, en el ejemplo 7 (II-\$4) probamos que existe una base ortonormal numerable $\{\phi_i\}_{i=1}^{\infty}$ con la cual definimos las proyecciones ortogonales

$$(5.2) \qquad \mathbb{P}_N = \sum_{i=1}^{N} |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$$

que tiene las propiedades siguientes

i) $\mathbb{P}_N \leq \mathbb{P}_{N+1}$

ii) $\{\mathbb{P}_N\}$ converge fuertemente a la unidad

$$\lim \| \mathbb{P}_N u - 1\, u \| = 0 \qquad \text{para cada } u \in H.$$

Denotamos por E_N al espacio sobre el que proyecta $\mathbb{P}_N$; es decir, E_N es el espacio de dimensión finita generado por $\{\phi_j\}_{j=1}^{N}$, es claro que $E_N \subset E_{N+1}$

Proyección de $\lambda Tu=u$. La ecuación (5.1) la sustituimos por

$$(5.3) \qquad \lambda^{(N)}\, \mathbb{P}_N T \mathbb{P}_N\, u^{(N)} = u^{(N)}$$

donde $T_N = P_N T\, \mathbb{P}_N$ es un operador compacto, autoadjunto y de rango finito (II-\$6.2) sobre E_N, $u^{(N)}$ es un vector propio de T_N y $\lambda^{(N)}$ el respectivo autovalor. Como E_N es de dimensión finita el operador T_N tiene la representación matricial

$$T_{ij}^{(N)} = \langle \phi_i | T | \phi_j \rangle \qquad , \quad 1 \leq i,j \leq N$$

por tanto resolver (5.3) es lo mismo que diagonalizar la matriz $\{T_{ij}^{(N)}\}$ en la base $\{\phi_j\}$ de E_N.

Deacuerdo al Teo. (6.4)-II, la compacidad de T permite porbar que la sucesión de operadores $\{T_N\}$ de rango finito converge a T en la norma de operadores

(5.4) $\lim \| T_N - T \| = 0$,

con lo que demostraremos que los autovalores y autovectores de los T_N convergen a los de T y sólo a ellos.

2. Convergencia al espectro

La compacidad y autoadjuntes del operador T en (H,<.,.>) permite dar una caracterización precisa del espectro de T_N y T. Aquí entendemos el espectro de T, T_N como los escalares para los cuales (5.1) y (5.3) tienen soluciones no triviales en (H,<.,.>).

Proposición (5.1). Si el operador T es compacto y autoadjunto entonces

i) el espectro de T es puntual, acotado y no tiene puntos de acumulación (cada autovalor es aislado)

ii) el espectro de cada T_N consiste de un número finito de puntos $\lambda^{(N)}$ aislados .

El lema siguiente contiene la esencia de la demostración de la convergencia de los espectros $\sigma(T)$ y $\sigma(T_N)$.

Lema (5.1). Si la sucesión de operadores $\{T_N\}$ converge a T en la norma de operadores

$$\lim \| T_N - T \| = 0$$

entonces para cada conjunto compacto $\Gamma \subset \rho(T)$ se cumple

i) existe una constante C>0 para la cual tenemos

$$\| R(z,T) \| \leq C \quad \text{para } z \in \Gamma \quad , \quad R(z,T) = (T-z)^{-1};$$

esto significa que la resolvente $R(z,T)=(T-z)^{-1}$ está acotada por una contante C>0 que no depende de cada $z \in \Gamma$ en particular (es decir, R(z,T) está uniformemente acotada sobre Γ).

ii) para cada $0< \varepsilon <1$ existe una n_0 grande apartir de la cual para cada $n \geq n_0$ se cumple

$$\| T_N - T \| \leq \varepsilon / C$$

iii) la sucesión $R(z,T_N)=(T_N-z)^{-1}$ está uniformemente acotada tanto en n como en $z \in \Gamma$ y

$$\| R(z,T_N) \| \leq \frac{C}{1-\varepsilon} \qquad y \qquad \Gamma \subset \rho(T_N).$$

Demostración.

i) por analiticidad de la función resolvente sobre $\rho(T)$ si Γ es compacto entonces $\|R(z,T)\|$ es acotada sobre Γ ; es decir, existe una constante C>0 que sólo depende de Γ , y no de cada punto en particular, para la cual tenemos $\| R(z,T) \| \leq C$.

ii) por tener una sucesión numérica convergente $\| T_N - T \|$, para cada ε existe una n_0 apartir de la cual se cumple $\|T_N - T\| < \varepsilon / C$.

iii) sea $z \in \Gamma$ arbitrario, mostremos que $(T_N-z)^{-1}$ está definido.

Como $z \in \rho(T)$, R(z,T) está definido y es acotado en norma por C (i); por (ii) para $n \geq n_0$ tenemos

$$T_N - z = (T - z)\,[1 + R(z,T)\,(T_N - T)] \quad ,$$

$$\| R(z,T)(T_N - T) \| \leq \| R(z,T) \| \cdot \| T_N - T \| < C\,\frac{\varepsilon}{C} = \varepsilon < 1$$

por tanto $1+R(z,T)(T -T)$ es inyectivo y tiene inversa acotada (Teo. (1.6)-II); esto prueba que $(T-z)(1+R(z,T)(T -T))$ tiene inversa acotada

$$(T_N - z)^{-1} = R(z,T_N) = [1 + R(z,T)(T_N - T)]^{-1}\, R(z,T) \in B(H)$$

y además

$$\| R(z,T_N) \| \leq \| [1 + R(z,T)(T_N - T)]^{-1} \| \cdot \| R(z,T) \|$$

$$\| R(z,T_N) \| < \frac{C}{1-\varepsilon}$$

QED

lo que se cumple para $z \in \Gamma$ arbitraria y a partir de una n_0 grande.

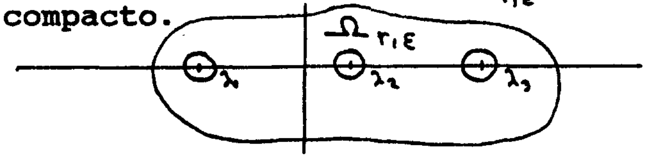
Ahora podemos mostrar la convergencia de los espectros, la prueba la dividiremos en dos partes :

Proposición (5.2). Sean T, T_N compactos y $\lim \| T_N - T \| = 0$. Entonces cada punto límite de una secuencia convergente de autovalores $\{\lambda^{(N)}\}$ de ecuaciones (5.3) es un autovalor de T .

Demostración.

1) por compacidad de T, dentro de un disco D(r) con centro en el origen y radio=r hay sólo un número finito de autovalores aislados de T $\{\lambda_k\}_{k=1}^{m}$.

2) por estar aislados λ_k , existe una $\varepsilon>0$ de manera que el disco abierto $D(\lambda_k, \varepsilon)$ aisla a λ_k de los demas autovalores y esta contenido en D(r) por lo cual $\Omega_{r,\varepsilon} = \overline{D(r)} \setminus \bigcup_{k=1}^{m} D(\lambda_k, \varepsilon)$ es un conjunto compacto.



3) por lema (5.1) se deduce que apartir de una n_0 grande se cumple $\Omega_{r,\varepsilon} \subset \rho(T_N)$. Como T_N es compacto sólo posee un número finito de autovalores en D(r) y ya que $\Omega_{r,\varepsilon} \subset \rho(T_N)$, se deduce que sus autovalores estan en la unión de los discos para r-grande

$$\lambda_k^{(N)} \in \bigcup_{k=1}^{m} D(\lambda_k, \varepsilon)$$

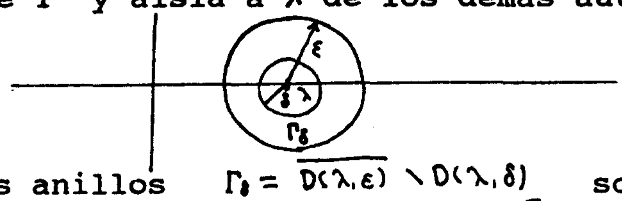
y como $\varepsilon>0$ es arbitrariamente pequeña se obtiene la afirmación anterior.

QED

Proposición (5.3). Si λ está en el espectro de T entonces existe una sucesión de autovalores $\{\lambda^{(N)}\}$ de ecuaciones (5.3) que converge a λ .

Demostración por absurdo.

1) Si no existe tal sucesión de autovalores de las matrices T_N ,hay un disco $D(\lambda, e)$ concentro en λ de radio pequeño que no tiene autovalores de T y aisla a λ de los demás autovalores de T.



2) para $0 < \delta < \varepsilon$ los anillos $\Gamma_\delta = \overline{D(\lambda,\varepsilon)} \setminus D(\lambda,\delta)$ son compactos y como $\Gamma_\delta \subset \rho(T)$ se deduce, por lema (5.3), que $\Gamma_\delta \subset \rho(T_N)$ apartir de n_0-grande. Ya que para cada $\delta > 0$ se tiene $\Gamma_\delta \subset \rho(T_N)$ y $\| R(z,T_N) \| \leq C_\delta$ se deduce que existe una C>0 para la cual tenemos

$$\|R(z,T_N)\| \leq C \quad ;$$

en otras palabras, como cerca de λ no hay autovalores de T_N y $R(z,T_N)$ está acotada en $D(\lambda,\epsilon)$, cada resolvente $R(z,T_N)$ puede prolongarse analíticamente a todo el disco $D(\lambda,\epsilon)$.

3) Finalmente para cada $\delta > 0$ tenemos

$$R(z,T) = R(z,T_N)\,[1 + (T_N - T)\,R(z,T_N)]^{-1} \quad , z \in \Gamma_\delta \quad y$$

$$\|R(z,T)\| \leq C\,\{1 - C\,\|T_N - T\|\}^{-1} \quad ,$$

Absurdo ya que por ser λ una singularidad de la resolvente $R(z,T)$ esta no puede estar acotada como afirma la desigualdad anterior. QED

Con las dos proposiciones anteriores tenemos el

Teorema (5.2). Para la sucesión de operadores $\{T_N\}$ compactos y autoadjuntos que converge al operador T en la norma de operadores tenemos :

1) cada sucesión convergente $\{\lambda^{(N)}\}$ de autovalores de las matrices T_N converge a un autovalor de T

2) si λ es un autovalor de T entonces existe una sucesión de autovalores $\{\lambda^{(N)}\}$ de las matrices T_N que converge a λ .

3. Convergencia de funciones propias

Probada la convergencia del espectro $\lim \sigma(T_N) = \sigma(T)$ es inmediata la prueba de que tambien el espacio propio asociado a cada $\lambda^{(N)}$ converge al espacio propio correspondiente al autovalor al λ al que converge $\{\lambda^{(N)}\}$.

Teorema (5.3). Si $\{\lambda^{(N)}\}$ es una sucesion de autovalores de las matrices T que converge al autovalor de T entonces

1) $\dim N(T_N - \lambda^{(N)}) = \dim N(T - \lambda)$

apartir de n_0-grande; es decir, el número de funciones propias de $\lambda^{(N)}$ y λ es igual

2) sean $\mathbb{P}^{(N)}, \mathbb{P}$ las proyecciones sobre los espacios propios asociados a $\lambda^{(N)}$ y λ respectivamente, entonces

$$\lim \|\mathbb{P}^{(N)} - \mathbb{P}\| = 0.$$

Demostración.

Como $\lambda^{(N)} \longrightarrow \lambda$ podemos tomar Γ= círculo que encierra a λ y $\lambda^{(N)}$ apartir de n_0-grande, por tanto

$$\mathbb{P}^{(N)} = \frac{-1}{2\pi i}\int_\Gamma R(z,T_N)\,dz \qquad y \qquad \mathbb{P} = \frac{-1}{2\pi i}\int_\Gamma R(z,T)\,dz$$

están bien definidos ya que $\Gamma \subset \rho(T_N) \cap \rho(T)$. La compacidad de Γ implica que $R(z,T)$ y $R(z,T_N)$ están uniformemente acotados en z y n (lema5.1)

$$\|R(z,T)\| \, , \, \|R(z,T_N)\| \leq C$$

y usando la identidad resolvente

$$R(z,T_N) - R(z,T) = R(z,T_N)\,(T - T_N)\,R(z,T)$$

tenemos $$\|\mathbb{P}^{(N)} - \mathbb{P}\| \leq \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} C^2\,\|T_N - T\|\,dz$$

de donde se concluye la afirmacion del Teorema.

4. Diagonalización de $\mathbb{H}_\Omega$

Hemos probado que el cálculo del espectro y funciones propias de la resolvente $R_\Omega(b)$ del operador $\mathbb{H}_\Omega$ puede hacerse diagonalizando las matrices

$$R_{ij} = \langle \phi_i \mid R_\Omega(b) \mid \phi_j \rangle$$

pero esto parece muy abstracto ya que no conocemos explicitamente a la resolvente, sólo al operador $\mathbb{H}_\Omega$. Sin embargo en cada espacio de dimensión finita E_N ,generado por la B.O.N $\{\phi_j\}$, podemos calcular la inversa de la matriz R_{ij} que es precisamente la representación matricial de $\mathbb{H}_\Omega - b$ en E_N

1) $R_\Omega(b)(\mathbb{H}_\Omega - b)^{-1}$ = identidad en $L2(\Omega)$
en particular se cumple en E_N, por tanto

$$\langle \phi_i \mid R_\Omega(b)(\mathbb{H}_\Omega - b) \mid \phi_j \rangle = \delta_{ij} \qquad , 1 \leq i,j \leq N$$

2) en E_N la identidad tiene la forma

$$\sum_{k=1}^{N} \mid \phi_k \rangle \langle \phi_k \mid = 1$$

lo que transforma la segunda ecuación de (1) en

$$\langle \phi_i \mid R_\Omega(b)(\mathbb{H}_\Omega - b) \mid \phi_j \rangle = \sum_{K=1}^{N} \langle \phi_i \mid R_\Omega(b) \mid \phi_k \rangle \langle \phi_k \mid \mathbb{H}_\Omega - b \mid \phi_j \rangle = \delta_{ij}$$

3) por tanto la ecuacion matricial sobre E_N

$$\sum_{j=1}^{N} [\langle \phi_i \mid R_\Omega(b) \mid \phi_j \rangle - \lambda^{(N)^{-1}} \delta_{ij}] u_j^{(N)} = 1 \qquad , 1 \leq i \leq N$$

se transforma en

$$\sum_{j=1}^{N} [\langle \phi_i \mid \mathbb{H}_\Omega \mid \phi_j \rangle - (\lambda^{(N)} + b)^{-1} \delta_{ij}] u_j^{(N)} = 1$$

donde los elementos de matriz $\{\mathbb{H}_{ij}\}$ pueden calcularse explícitamente.

V CONVERGENCIA GENERALIZADA FUERTE Y EL PROBLEMA DE AUTOVALORES PARA OPERADORES DE SCHRÖEDINGER EL $L2(R^m)$

En la sección $1 definimos la sucesión de operadores $\mathbb{H}_n: L2(R^m)\circlearrowleft$ y describimos algunas de sus propiedades, de las cuales las más importante es la convergencia en el sentido generalizado fuerte al operador $\mathbb{H}:L2(R^m)\circlearrowleft$. Apartir de la convergencia generalizada de $\{\mathbb{H}_n\}$ en $2 mostraremos que podemos converger a cada autovalor aislado de $\mathbb{H}$ por una sucesión de autovalores de los operadores $\mathbb{H}_n$. En $3 mostramos que bajo hipotesis que sólo dependen del espectro $\sigma(\mathbb{H})$ de $\mathbb{H}$ podemos converger a las funciones propias correspondientes.

Hagamos un resumen de las propiedades de los operadores $\mathbb{H}:L2(R^m)\circlearrowleft$ y $\mathbb{H}^1_\Omega:L2(\Omega)\circlearrowleft$ que estudiamos en los capitulos III y IV respectivamente.

(I) . Las hipotesis que asumimos sobre el potencial $q(x):R^m\text{-->}R$ son de dos tipos :

(0.1) $q(x)\in M_\rho(R^m)$ para alguna $\rho<4$
o'
(0.2) $q(x)\in M_{\rho,loc}(R^m)$ para alguna $\rho<4$ y tiene la forma $q=q_1+q_2$ donde q_1 y q_2 satisfacen
i) $q(x)\in M_{\rho<4}(R^m)$
ii) $q(x)\geq -C|x|^2$ para una $C\geq 0$ y para cada $x\in R^m$

donde $M_{\rho,loc}(R^m)$ y $M_\rho(R\ )$ son familias de potenciales defninidas en III-$4.4.

Las propiedades que enunciaremos para los operadores $\mathbb{H}_n$ y $\mathbb{H}$ son consecuencia de las hipotesis asumidas para el potencial $q(x)$ (capítulo III, $4.4 y $5.4).

(II) . El operador $\mathbb{H}:L2(R^m)\circlearrowleft$.

1) el operador minimal $\mathbb{H}_0:L2(R^m)\circlearrowleft$ dado por

$$D(\mathbb{H}_0)=C_0^\infty(R^m)\quad,\ \mathbb{H}_0 f=-\Delta f+q f$$

(donde las derivadas tienen el sentido clásico) tiene las propiedades siguientes

i) es simétrico y acotado por abajo por una contante λ_0
ii) es esencialemente autoadjunto; es decir , tiene una única extensión autoadjunta acotada por abajo por λ_0

2) el operador $\mathbb{H}$ denota la extensión autoadjunta de $\mathbb{H}_0$ sobre $L2(R^m)$ (Teoremas 4.5 y 4.7,III)

i) $C_0^\infty(R^m)$ es denso en la gráfica de $\mathbb{H}$ (es un core de $\mathbb{H}$)

ii) la forma cuadrática que define a la energía

$$E(u)=\langle \mathbb{H}u,u\rangle=\langle\nabla u,\nabla u\rangle+\langle qu,u\rangle$$

es acotada por abajo por λ_0 (=cota inferior de $\mathbb{H}$)

3) en todos los casos de interés el operador $\mathbb{H}$ tiene un espectro puntual que deseamos calcular por lo que asumiremos que:

el operador $\mathbb{H}$ tiene autovalores aislados con multiplicidad finita

Nota. Las hipotesis sobre el espectro de $\mathbb{H}$ se cumplen en casos como el oscilador armónico, átomos y moleculas. En los capitulos VI y VII demostraremos esta propiedades para varios casos de interes.

(III). El operador $\mathbb{H}^1_\Omega : L2(\Omega)\circlearrowleft$.

Para la region $\Omega \subset R^m$ abierta,conexa y con frontera suave tenemos

1) el operador minimal $\mathbb{H}^0_\Omega : L2(\Omega)\circlearrowleft$ dado por

$$D(\mathbb{H}^0_\Omega) = C^\infty_0(\Omega) \;, \quad \mathbb{H}_\Omega f = -\Delta f + q f$$

es simétrico y acotado por abajo por λ_0

2) la forma $h_\Omega(.,.)$ sobre $L2(\Omega)$ dada por

$$D(h_\Omega) = W^0_1(\Omega) \;, \quad h_\Omega(u,v) = \langle \nabla u, \nabla v\rangle + \langle qu, v\rangle$$

es cerrada, acotada y elíptica en la norma $\|.\|_1$

3) el operador $\mathbb{H}^1_\Omega : L2(\Omega)\circlearrowleft$ denota la extensión de Friedrichs del operador minimal $\mathbb{H}^0_\Omega$, dado por

$$D(\mathbb{H}^1_\Omega) = W^0_1(\Omega) \cap W_2(\Omega) \;; \quad \mathbb{H}^1_\Omega f = -\Delta f + q f$$

tiene las propiedades siguientes :

i) es autoadjunto en $L2(\Omega)$ y acotado por abajo por λ_0

ii) tiene resolvente compacta $R^1_\Omega(b) = (\mathbb{H}^1_\Omega - b)^{-1}$, $b \in \rho(\mathbb{H}^1_\Omega)$

iii) el espectro de $\mathbb{H}^1_\Omega$ es puntual, acotado por abajo por λ_0 y sin puntos de acumulación

iv) cada autovalor tiene multiplicidad finita .

Observación. Hemos afirmado que la cota inferior λ_0 de $\mathbb{H}$ también es una cota inferior de $\mathbb{H}^1_\Omega$ lo que probaremos en $1.3 .

$1 Convergencia generalizada fuerte de la sucesión $\{\mathbb{H}_n\}_{n=1}^{\infty}$

---

1. Los operadores $\mathbb{H}_\Omega : L2(R^m)\circlearrowleft$

Cada operador $\mathbb{H}^1_\Omega$ es autoadjunto sobre $L2(\Omega)$ y $\mathbb{H}$ es autoadjunto en $L2(R^m)$. Como los espacios $L2(\Omega)$ y $L2(R^m)$ son distintos no pueden compararse $\mathbb{H}^1_\Omega$ y $\mathbb{H}$, para evitar esta "dificultad tecnica" introducimos los operadores $\mathbb{H}_\Omega$ que sí son autoadjuntos en $L2(R^m)$ y que tienen esencialmente las mismas propiedades de los $\mathbb{H}^1_\Omega$.

El concepto de ortogonalidad que distingue a los espacios de Hilbert de los demas espacios vectoriales es la clave para definir apropiadamente al operador $\mathbb{H}_\Omega$.

La descomposición $L2(R^m)=L2(\Omega)+L2(\Omega)^\perp$. El espacio de Hilbert $L2(\Omega)$ es el conjunto de funciones cuadrado integrables con el producto interior

$$\langle f, g\rangle = \int_\Omega f^* g \, dx ,$$

como cada $f(x)\in L2(\Omega)$ puede verse como un elemento de $L2(R^m)$ si lo definimos como cero fuera de $\bar{\Omega}$

$$(1.1) \qquad \hat{f}(x)=\begin{cases} f(x) & x\in \bar{\Omega} \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

y ya que el producto interior de $L2(\Omega)$ es restricción del de $L2(R^m)$ entonces $L2(\Omega)$ es un subespacio cerrado de $L2(R^m)$.

Proposición (1.1). Si cada elemento de $L2(\Omega)$ se identifica como un elemento de $L2(R^m)$ según (1.1) entonces $L2(\Omega)$ es un subespacio cerrado de $L2(R^m)$.

Aplicando el Teorema de Proyeccion tenemos la

Proposición (1.2). El espacio $L2(R^m)$ admite la descomposicion

$$L_2(R^m) = L_2(\Omega) \oplus L_2(\Omega)^\perp ;$$

es decir, cada $f(x)\in L2(R^m)$ tiene una expresión única de la forma

$$f = f_1 + f_2 \quad , \; f_1 \in L_2(\Omega) \; \text{ y } \; f_2 \in L_2(\Omega)^\perp ,$$

donde $L2(\Omega)^\perp=\{f\in L2(R^m) \mid f(x)=0 \text{ en } \Omega \}$

Con la descomposición anterior de $L2(R^m)$ definimos la suma ortogonal del operador $\mathbb{H}^1_\Omega : L2(\Omega)\circlearrowleft$ con el operador cero $\mathcal{O}$ sobre $L2(\Omega)^\perp$. La proposición siguiente resume algunas propiedades del operador cero.

Proposición (1.3). El operador cero sobre $L2(\Omega)^\perp$ definido como

$$D(\mathcal{O}) = L_2(\Omega)^\perp \quad , \; \mathcal{O} f = 0$$

tiene las propiedades siguientes

i) es acotado y autoadjunto sobre $L2(\Omega)^\perp$

ii) $\sigma(\mathcal{O})=\sigma_e(\mathcal{O})= 0$.

Def (1.1). El operador $\mathbb{H}_\Omega : L2(R^m)\circlearrowleft$ se define como la suma ortogonal de los operadores $\mathbb{H}^1_\Omega$ y $\mathcal{O}$ de la siguiente manera :

si $\mathbb{P}_\Omega$ y $\mathbb{P}^\perp_\Omega$ son las proyecciones ortogonales sobre $L2(\Omega)$ y $L2(\Omega)^\perp$ respectivamente entonces

$$D(\mathbb{H}_\Omega)= \{f\in L2(R^m) \mid \mathbb{P}_\Omega f\in D(\mathbb{H}^1_\Omega) \text{ y } \mathbb{P}^\perp_\Omega f\in L2(\Omega)^\perp\}$$

$$\mathbb{H}_\Omega f = \mathbb{H}^1_\Omega \mathbb{P}_\Omega f + \mathcal{O}\,\mathbb{P}^\perp_\Omega f = \mathbb{H}^1_\Omega \mathbb{P}_\Omega f \; ;$$

por construcción, las proyecciones $\mathbb{P}_\Omega$ y $\mathbb{P}^\perp_\Omega$ satisfacen

i) $\mathbb{P}_\Omega \mathbb{P}^\perp_\Omega = \mathbb{P}^\perp_\Omega \mathbb{P}=0$

ii) $\mathbb{P}_\Omega \mathbb{H}_\Omega \subset \mathbb{H}_\Omega \mathbb{P}_\Omega$ y lo mismo con $\mathbb{P}^\perp_\Omega$; es decir, $\mathbb{P}_\Omega$ y $\mathbb{P}^\perp_\Omega$ conmutan con $\mathbb{H}_\Omega$ (II,§3.2)

por tanto el Teo. (3.1)-III afirma que $D(\mathbb{H}^1_\Omega)$ y $D(\mathcal{O})$ son subespacios invariantes de $\mathbb{H}_\Omega$; mas aún, deacuerdo a

$$\mathbb{H}_\Omega f = \mathbb{H}^1_\Omega \mathbb{P}_\Omega f \qquad \text{para } \; f\in D(\mathbb{H}_\Omega)$$

tenemos que las propiedades de $\mathbb{H}^1_\Omega$ y $\mathbb{H}_\Omega$ son esencialmente las mismas como afirma el

Teorema (1.1). El operador $\mathbb{H}_\Omega : L2(R^m) \circlearrowleft$ tiene las propiedades

i) es autoadjunto en $L2(R^m)$

ii) $\sigma(\mathbb{H}_\Omega) = \sigma(\mathbb{H}^1_\Omega) \cup \sigma(\Theta) = \sigma(\mathbb{H}^1_\Omega) \cup \{0\}$

iii) toda función propia de $\mathbb{H}^1_\Omega$ es función propia de $\mathbb{H}_\Omega$ con el mismo autovalor .

Nota. Al mencionar a $\mathbb{H}_\Omega : L2(R^m) \circlearrowleft$ nos referimos a $\mathbb{H}^1_\Omega : L2(\Omega) \circlearrowleft$.

2. Convergencia generalizada fuerte de operadores autodjuntos

Al expander Ω generamos una sucesión de regiones Ω_n, en cada Ω_n tenemos el operador $\mathbb{H}^1_{\Omega_n}$ (III)-3 que induce el operador autoadjunto sobre $L2(R^m)$ dado en la def. (1.1) y que llamaremos $\mathbb{H}_n$ en lo que resta del capítulo. La sucesión de operadores autoadjuntos $\{\mathbb{H}_n\}$ tiene una serie de propiedades importantes para nuestros objetivos que estudiaremos a continuación.

Hasta el momento hemos desarrollado nociones de convergencia para sucesiones de operadores que solo involucran operadores acotados (ver II,$1.6):

1) Convergencia en la norma de operadores: si T, T_n son acotados y $\lim \| T_n - T \| = 0$, donde $\|\cdot\|$ es la norma del espacio de operadores acotados sobre $L2(R^m)$

2) Convergencia fuerte $T_n \xrightarrow{s} T$: si T, T_n son acotados y se cumple $\lim \| T_n f - Tf \| = 0$ para cada $f(x) \in L2(R^m)$

3) Convergencia débil $T_n \xrightarrow{w} T$: si T, T_n son acotados y se cumple $\lim \langle T_n f, g \rangle = \langle Tf, g \rangle$ para cada par $f(x), g(x) \in L2(R^m)$.

En nuestro caso tenemos un sucesión de operadores $\{\mathbb{H}_n\}$ autoadjuntos sobre $L2(R^m)$ que NO son acotados, por lo cual no podemos aplicar las nociones de convergencia de operadores arriba mencionadas; sin embargo, sabemos que la resolvete $R_n(z)$ de cada operador $\mathbb{H}_n$ es un operador acotado y autoadjunto sobre $L2(R^m)$ por tanto en lugar de trabajar directamente con los operadores $\mathbb{H}_n$ lo haremos con sus resolventes. El primer resultado es que la resolvente $R_n(z)$ siempre está definida para cada complejo $z \in \mathbb{C} \setminus R$ (ver Teo. (3.7)-III).

Proposición (1.2). Si T es un operador autoadjunto sobre $L2(R^m)$ y $z \in \mathbb{C} \setminus R$ entonces $R(z) = (T-z)^{-1}$ está bien definido, es acotado y

$$\| R(z) \| \leq |Im(z)|^{-1}.$$

Este resultado es interesante ya que da una cota de la norma de $R(z)$ que sólo depende de z y no del operador T, salvo por la hipótesis de que T es autoadjunto; de esta observación es inmediato el corolario siguiente.

Corolario (1.3). Si $\{T_n\}$ es una sucesión de operadores autoadjuntos entonces la sucesión $\{R_n(z)\}$, $R_n(z)=(T_n-z)^{-1}$, está uniformemente acotada en n para cada $z\in\mathbb{C}\setminus R$: $\| R_n(z)\| \leq |Im(z)|^{-1}$.

Hay otro aspecto muy interesante de las sucesiones de operadores autoadjuntos en general, que muestra el

Teorema (1.2). Sean $T, T_n (n\in\mathbb{N})$ operadores autoadjuntos en $L2(R^m)$. Si existe una $z_o\in\mathbb{C}\setminus R$ para la cual se tiene $R_n(z_o) \xrightarrow{s} R(z_o)$ Entonces $R_n(z) \xrightarrow{s} R(z)$ se cumple para toda $z\in\mathbb{C}\setminus R$.

Nota. Es interesante observar que la autoadjuntez de los operadores permite extender una propiedad local (en un punto) a todo el plano complejo exceptuando tal vez el eje real; como veremos enseguida, la afirmación del Teo. (1.2) puede extenderse a intervalos del eje real que excluyen al espectro del operador T y de cada T_n apartir de una n_o grande.

Para poder extender el Teorema anterior a puntos del eje real, minimamente necesitamos que tales puntos reales no pertenezcan al espectro de cada operador T apartir de una n_o grande, lo que nos lleva a definir el conjunto de acotacion Δ_b .

Def. La región de acotacion Δ_b de una sucesión de operadores autoadjuntos $\{T_n\}$ es el conjunto de los numeros complejos en los cuales $R_n(z)$ tiene sentido y la sucesión $\{R_n(z)\}$ está acotada a partir de una n_o grande :

$$\| R_n(z)\| \leq M(z) ;$$

de esta definición y del corolario (1.3) tenemos la

Proposición (1.4). Para cada sucesión de operadores autoadjuntos $\{T_n\}$ se cumple

$$\mathbb{C}\setminus R \subset \Delta_b ;$$

ya en cada $z\in\mathbb{C}\setminus R$, $R_n(z)$ tiene una cota que sólo depende de z.

Tenemos otra propiedad interesante del conjunto de acotación .

Proposición (1.5). Δ_b es un conjunto abierto del plano $\mathbb{C}$; sobre cada subconjunto compacto Γ de Δ_b la sucesión $\{R_n(z)\}$ está uniformemente acotada en $\underline{z}$ y $\underline{n}$ apartir de una n_o-grande.

Sean T, T_n los, operadores del Teo. (1.2); la condición $z\in\Delta_b$ no basta para garantizar que $R_n(z) \xrightarrow{s} R(z)$ se cumple ya que puede suceder que $z\in\sigma(T)$ por tanto almenos debe satisfacerse $z\in \Delta_b\cap\rho(T)$. Hay una hipotesis adicional que garantiza $R_n(z) \xrightarrow{s} R(z)$ sobre $\Delta_b\cap\rho(T)$ como muestra el

Teorema (1.3). Supongamos que :

i) $T, T_n (n\in\mathbb{N})$ son autoadjuntos en $L2(R^m)$

ii) D_o es un core de T; es decir, la restricción de T a D_o da un operador T_o que es esencialmente autoadjunto ($\overline{T}_o= T$)

iii) para cada $u(x)\in D_o$ se cumple $\lim \| T_n u-Tu \| =0$

Entonces $R_n(z) \xrightarrow{s} R(z)$ se cumple para cada $z\in\rho(T)\cap\Delta_b$.

Este teorema es básico para nuestros propósitos y permite introducir un concepto de convergencia para sucesiones de operadores autoadjuntos.

Def. Se dice que la sucesión de operadores autoadjuntos $\{T_n\}$ en $L2(R^m)$ converge al operador autoadjunto T en $L2(R^m)$ en el sentido generalizado fuerte (notacion $T_n \xrightarrow{s} T$) si tiene lugar $R_n(z) \xrightarrow{s} R(z)$ para cada $z \in \Delta_b \cap \rho(T)$.

Demostración de Teo. (1.3) .
1) si $z \in \Delta_b \cap \rho(T)$ tenemos $z \in \rho(T_n)$ apartir de una n_0- grande por tanto la identidad resolvente está bien definida

$$R_n(z) - R(z) = R_n(z)(T_n - T)R(z)$$

2) sea F=imgen de D_0 bajo $T = T[D_0]$, como T es autoadjunto entonces F está en el rango de la resolvente $R(z)=(T-z)^{-1}$ y es denso en $L2(R^m)$, por lo cual si $f(x) \in F$ tenemos $u(x)=R(z)f(x) \in D_0$

$$\|R_n(z)f - R(z)f\| \leq \|R_n(z)\| \cdot \|T_n u - Tu\| \quad ;$$

por definicion de Δ_b tenemos

$$\|R_n(z)\| \leq M(z) \quad y \quad \|R_n(z)f - R(z)f\| \leq M(z)\,\|T_n u - Tu\|$$

3) Entonces $\lim \|T_n u - Tu\| = 0$ implica $\lim \|R_n(z)f - R(z)f\| = 0$ para cada $f(x) \in F = T[D_0]$, y como D_0 es denso en el dominio de T el último límite puede extenderse a todo elemento de D(T); es decir, a todo $f(x) \in L2(R^m)$. QED

3. Convergencia generalizada fuerte de la sucesión $\{\mathbb{H}_n\}$

En esta sección estudiaremos las propiedades de la sucesión formada por los operadores $\mathbb{H}_n$ (Def 1.1).

1) Convergencia Generalizada fuerte $\mathbb{H}_n \xrightarrow{s} \mathbb{H}$. Para los potenciales que satisfacen (0.1) o (0.2) el operador minimal $\mathbb{H}_0$ (II)-1 es esencialmete autoadjunto en $L2(R^m)$, por lo que su cerradura es el operador autoadjunto $\mathbb{H}$ (II)-2 y $C_0^\infty(R^m)$ es un <u>core</u> de $\mathbb{H}$. Ahora demostraremos que la sucesion $\{\mathbb{H}_n\}$ converge a $\mathbb{H}$ en el sentido generalizado fuerte.

Si $u(x) \in C_0^\infty(R^m)$ tenemos

$$\mathbb{H}_0 u = -\Delta u + qu \quad \text{(derivadas clásicas)}$$

como el soporte de u(x) esta contenido en una Ω_{n_0} para n_0 suficientemente grande entonces para $n \geq n_0$ tenemos $u(x) \in C_0^\infty(\Omega_n) \subset D(\mathbb{H}_n)$ y

$$\mathbb{H}_n u = H_n^1 u = -\Delta u + qu$$

donde las derivadas tienen el sentido clásico por tanto

$$\mathbb{H}_0 u = \mathbb{H}_n u \quad \text{implica} \quad \lim \|\mathbb{H}_n u - \mathbb{H} u\| = 0$$

y según el Teorema (1.3) la sucesión $\{\mathbb{H}_n\}$ converge en el sentido generalizado fuerte al operador $\mathbb{H}$. qed

Ahora veamos quién es el conjunto $\Delta_b \cap \rho(\mathbb{H})$.

2) $\mathbb{C}\setminus R \subset \Delta_b \cap \rho(\mathbb{H})$. Ya que $\mathbb{H}, \mathbb{H}_n$ son autoadjuntos es inmediato que, por proposicion (1.4) y Teo. (1.2), $\mathbb{C}\setminus R \subset \Delta_b \cap \rho(\mathbb{H})$ entonces la parte interesante de $\Delta_b \cap \rho(\mathbb{H})$ está en el eje real.

3) $(-\infty,\lambda_0)\subset \Delta_b \cap \rho(\mathbb{H})$. Por hipótesis la parte inferior del espectro de $\mathbb{H}$ consiste de autovalores aislados y de multiplicidad finita, al mínimo autovalor lo hemos llamado λ_0 de manera que se cumple

$$E(u) = \langle \mathbb{H} u, u\rangle \geq \lambda_0 \|u\|^2 \quad \text{para } u \in C_0^\infty(R^m),$$

en particular sobre cada $C_0^\infty(\Omega_n)$

$$E(u) = h_{\Omega_n}(u,u) \geq \lambda_0 \|u\|^2$$

y por densidad de $C_0^\infty(\Omega_n)$ en $(W_1^0(\Omega_n), \langle .,. \rangle_1)$:

$$h_{\Omega_n}(u,u) = \langle \mathbb{H}_n^1 u, u\rangle = \langle \mathbb{H}_n u, u\rangle \geq \lambda_0 \|u\|^2 \quad \text{para } u \in D(\mathbb{H}_n^1)$$

por tanto la sucesión $\{\mathbb{H}_n\}$ está acotada por abajo por λ_0 .

4) Comportamiento 'local' del espectro de $\mathbb{H}_n$. Por sencillez, para estudiar el comportamiento del espectro de $\mathbb{H}_n$ al cambiar continuamente de forma a Ω_n , consideraremos que Ω_n es la bola B_n de radio=r con centro en el origen. Para conocer como cambia el espectro de $\mathbb{H}_n$ al aumentar el radio de la bola, es conveniente estudiar lo que ocurre con el operador $\mathbb{H}_n^1$ cuando r varia continuamente alrededor de un radio arbitrario r_0, este estudio local se extiende a toda r>0 por prolongación analítica.

Notación. B_ε=bola de radio $r_\varepsilon=r(1+\varepsilon)$, $L2(\varepsilon)=L2(B_\varepsilon)$, $\varepsilon>0$.

Para cada r_ε tenemos el problema de autovalores sobre $L2(B_\varepsilon)$

(3.1) $\qquad \mathbb{H}_\varepsilon^1 u = \lambda u$

con la condición de frontera

(3.2) $\qquad u(\partial B_\varepsilon)=0$

donde $\mathbb{H}_\varepsilon^1$ es el operador autoadjunto descrito en (III), y r_ε está dada através de la transformación de coordenadas

(3.3) $\qquad y_j = x_j(1+\varepsilon) \quad , \quad |x|=r_0 \quad$ y $\quad r=|y|= r_0(1+\varepsilon)$;

al variar ε aparece la dificultad de que cambia el espacio de Hilbert $L2(\varepsilon)$, para evitar esta dificultad introducimos la transformación

(3.4) $\qquad u(y) = \hat{u}(x)$

que define una biyección entre $L2(\varepsilon)$ y $L2(0)$ que cambia el producto interior como

$$\int_{B_\varepsilon} f(y)^* g(y)\,dy = \int_{B_0} \hat{f}(x)^* \hat{g}(x)\, \varepsilon\, dx$$

y deja sin cambio las condiciones de frontera (3.2): $u(y)\in L2(\varepsilon)$ satisface (3.2) si y sólo si $\hat{u}(x)\in L2(0)$ tambien la cumple.

Para estudiar el problema de autovalores (3.2) usaremos la forma $h_\varepsilon(.,.)$ que define al operador $\mathbb{H}_\varepsilon^1$ en $L2(\varepsilon)$ via el Teorema de extensión de Friedrichs

$$h_\varepsilon(u,v) = \int_{B_\varepsilon} \{\nabla u(y)^* \cdot \nabla v(y) + q\, u^*(y) v(y)\}\,dy \ ;$$

aplicando la transformación de coordenadas (3.3) obtenemos

(3.5) $\qquad h_\varepsilon(u,v) = h(\varepsilon)(\hat{u},\hat{v}) = \int_{B_\varepsilon} \left\{\frac{1}{1+\varepsilon} \nabla_x \hat{u}^* \cdot \nabla_x \hat{v} + \hat{q}\, \hat{u}^* v\,(1+\varepsilon)\right\} dx$,

la forma $h(\varepsilon)$ tiene la ventaja de que está definida en el mismo espacio de Hilbert $L2(0)$ para cada ε lo que permite estudiar el cambio del espectro y funciones propias de $\mathbb{H}_\varepsilon^1$ al variar ε. Aplicando el Teorema de extensión de Friedrichs a la forma $h(\varepsilon)$ esta define un operador $\mathbb{H}(\varepsilon)$ autoadjunto en $L2(0)$ para cada ε

cuyo espectro es el mismo que el del operador $\mathbb{H}^1_\varepsilon$ y las funciones propias están relacionadas por la transformación (3.4). Ya que cada operador $\mathbb{H}^1_\varepsilon$ sobre L2(ε) tiene un espectro puramente puntual y sus autovalores son de multiplicidad finita entonces lo mismo ocurre con el espectro y autovalores de $\mathbb{H}(\varepsilon)$ sobre L2(0).

El siguiente teorema se obtiene de la teoría de perturbaciones analíticas de operadores en espacios de Hilbert.

Teorema (1.4). La forma $h(\varepsilon)$ (3.5) sobre L2(0) tiene las propiedades siguientes

i) es analítica en ε y tiene el desarrollo

$$h(\varepsilon)(u,u)=\int_{B_0}|\nabla\hat{u}|^2+\hat{q}|\hat{u}|^2dx+\varepsilon\int_{B_0}-|\nabla\hat{u}|^2+\hat{q}|\hat{u}|^2dx+\sum_{K=2}^{\infty}(-\varepsilon)^K\int_{B_0}|\nabla\hat{u}|^2dx$$

ii) los operadores $\mathbb{H}(\varepsilon)$ definen una familia holomorfica de operadores autoadjuntos en ε, la serie de $\mathbb{H}(\varepsilon)$ en potencias de ε la da precisamente el desarrollo en serie de $h(\varepsilon)$

$$\mathbb{H}(\varepsilon)=\mathbb{H}(0)+\varepsilon\,\mathbb{H}_1+\dots$$

iii) los autovalores $\lambda(\varepsilon)$ son funciones analíticas de ε y la multiplicidad es la misma para ε pequeño

iv) las funciones propias $u(x,\varepsilon)$ son funciones analíticas de ε.

Como r_0 es arbitrario por prolongación anlítica tenemos el

Teorema (1.5). El espectro de los operadores $\mathbb{H}(r)$ sobre L2(r) es puramente puntual, cada autovalor $\lambda_k(r)$ es una función analítica de r y para k-fija la multiplicidad de cada autovalor es constante. En particular se cumple para la sucesion de operadores $\{\mathbb{H}_n\}$.

Queda por resolver como son las gráficas de los autovalores $\lambda(\varepsilon)$. Si recordamos la formulación variacional clásica del problema de autovalores es de esperar que los autovalores de cada $\mathbb{H}_n$ decrezcan al aumentar n , lo que probaremos a continuación.

5) Formulación variacional clásica . En el capítulo anterior mostramos que las funciones propias de cada operador $\mathbb{H}^1_n$ pertenecen a $C^\infty(\bar{\Omega}_n)$ y satisfacen la condición de frontera $u(\partial\Omega_n)=0$, además dependen analíticamente de ε cuando $r=(1+\varepsilon)r_0$ y no cambian las condiciones de frontera al variar ε. Estas propiedades de las funciones propias permiten aplicar un resultado del cálculo de variaciones clásico que muestra que los autovalores $\lambda(r)$ decrecen al aumentar r. Nuevamente haremos un estudio local alrededor de un radio r_0 arbitrario.

Las funciones propias de cada operador $H(\varepsilon)$ son extremales del funcional cuadrático

$$E_\varepsilon(u)=\int_{B_\varepsilon}|\nabla u|^2+q|u|^2\,dy$$

y sus mínimos son precisamente los autovalores de $H(\varepsilon)$.

Para la calcular la variación clásica del funcional $E_\varepsilon(u)$ basta con trabajar en el conjunto de funciones con segundas derivadas continuas y que satisfacen la condición de frontera (3.2) ya que las funciones propias de cada operador $H(\varepsilon)$ pertenecen a este conjunto.

Para incluir la condición de normalización $\|u\|=1$ introducimos en $E_\varepsilon(u)$ el multiplicador de Lagrange λ que es precisamente el autovalor $\lambda(0)$ asociado a la función propia $u(0)$.

Definimos $F = |\nabla u|^2 + (q-\lambda)|u|^2$.

Teorema (1.6). La variación del funcional

$$(3.6) \qquad E_0(u) = \int_{B_0} |\nabla u|^2 + (q-\lambda)|u|^2\, dx$$

correspondiente a la transformación

$$(3.7) \qquad y_i = x_i(1+\varepsilon)$$

$(i=1,\ldots,m)$ está dada por

$$(3.8) \quad \delta E(u) = \int_{B_0} \Big(F_u - \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial}{\partial x_j} F_j\Big) dx + \varepsilon \int_{B_0} \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial}{\partial x_j}\big[F_j \overline{\Psi} + x_j F\big]\, dx$$

donde

$$F_j = \frac{\partial F}{\partial u_{x_j}}, \quad \overline{\Psi} = -\sum_{j=1}^{m} x_j \frac{\partial u}{\partial x_j}.$$

En nuestro caso $u(0)$ es una extremal de (3.6) por tanto (3.8) se reduce a

$$\delta E = \varepsilon \int_{B_0} \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial}{\partial x_j}\big[2 u_{x_j} \overline{\Psi} + x_j F\big]\, dx$$

e integrando por partes queda

$$\delta E = \varepsilon \sum_{j=1}^{m} \int_{\partial B_0} \big\{2 u_{x_j} \overline{\Psi} + x_j\big(|\nabla u|^2 + (q-\lambda)|u(\partial B)|^2\big)\big\}\, \eta_j\, dS$$

de lo cual se deduce que la variación es independiente del potencial $q-\lambda$ entonces para conocer el cambio de cada autovalor $\lambda(\varepsilon)$ basta hacerlo para el funcional

$$E(u) = \int_{B_0} |\nabla u|^2 - \lambda |u|^2\, dx$$

que define precisamente a la ecuación de Laplace

$$-\Delta u = \lambda u \qquad , \quad u(\partial B_0) = 0$$

cuyas soluciones son bien conocidas e imponendo la condición de frontera se obtiene que cada autovalor es de la forma

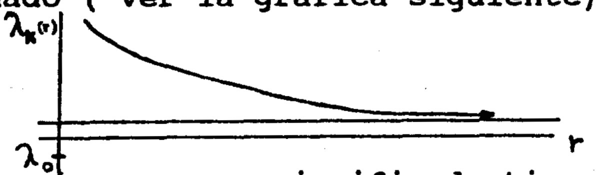
$$\lambda_k(\varepsilon) = \frac{C_k}{r_0(1+\varepsilon)}$$

y por tanto es una función decreciente del radio.

Otra propiedad de las graficas $\lambda(r)$ es la existencia de una asíntota a la cual "converge" cada gráfica.

Proposición (1.6). Cada curva $\lambda(r)$ se acerca asintóticamente a la recta horizontal definida por el $\inf[\lambda(r)]$.

Dem. Consideremos la sucesión decreciante de autovalores $\{\lambda_k^{(m)}\}$ sobre la gráfica, como esta sucesión esta acotada por arriba por $\lambda_k(0)$ y por abajo por λ_0 (la energía del estado base del sistema en estudio) entonces tiene una subsucesion $\{\lambda_k^{(n_m)}\}$ que converge al punto $\inf[\lambda(r)]$, usando la continuidad de la curva se sigue el resultado mencionado (ver la gráfica siguiente)



Finalmente queda por ver que significado tiene la asíntota de cada gráfica y cuantas graficas se acumulan en una misma asíntota, una de los resultados que mostraremos es que varias de estas asintotas son precisamente autovalores aislados del operador $\mathbb{H}$.

---

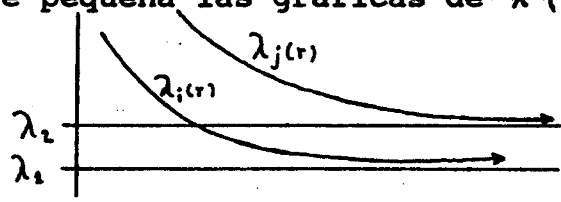
§2 Convergencia al espectro de $\mathbb{H}$

La convergencia en la norma de operadores implica la convergencia de los espectros, pero en el caso de convergencia generalizada fuerte esto no ocurre en general; sin embargo, mostraremos que cerca de cada autovalor de $\mathbb{H}$ hay almenos un autovalor de la sucesión $\{\mathbb{H}_n\}$.

Teorema (2.1). Supongamos que T, T_n son autoadjuntos en $L2(R^m)$. Si la sucesión $\{T_n\}$ converge en el sentido generalizado fuerte a T entonces cada abierto que contenga un punto del espectro de T contiene almenos un elemento del espectro de T_n apartir de n_0 grande.

Los operadores $\mathbb{H}$, $\mathbb{H}_n$. Al principio de este capítulo asumimos que la parte inferior del espectro de H consta de autovalores aislados de multiplicidad finita.

Supongamos que $\lambda_i(i=1,2)$ son puntos aislados del espectro puntal de $\mathbb{H}$, por lo cual existen discos $D(\lambda_i,\varepsilon)$, que aislan a λ_1 y λ_2 de los demás puntos del espectro de $\mathbb{H}$, y según el teorema anterior hay almenos un autovalor $\lambda_i^{(n)}$ de $\mathbb{H}_n$ apartir de una n_0 grande que pertenece a un disco $D(\lambda_i,\varepsilon)$ y como $\varepsilon>0$ es arbitrarimente pequeña las graficas de $\lambda^{(i)}(r)$ convergen a cada λ_i



¿cuantos autovalores de cada $\mathbb{H}_n$ se aproximan a un autovalor aislado de $\mathbb{H}$?.

Teorema (2.2). Si λ es un autovalor aislado de $\mathbb{H}$ entonces sólo un número finito de autovalores de cada $\mathbb{H}_n$ se aproxima a λ .

La demostración del teorema (2.2) es inmediata ya que el espectro de cada $\mathbb{H}_n$,con n arbitraria, no tiene puntos de acumulación por tanto en cada vecindad de λ solo puede haber un número finito de autovalores de cada $\mathbb{H}_n$, con n=constante.

Sea λ un autovalor aislado de $\mathbb{H}$ y Γ una curva que aisla a λ de los demás puntos de $\sigma(\mathbb{H})$; de Teo. (2.2) sabemos que Γ encierra un conjunto finito $\{\lambda_k^{(n)}\}_{k=1}^{m_n}$ de autovalores de cada $\mathbb{H}_n$ que se aproxima a λ apartir de una n_0 suficientemente grande por tanto la proyeccion $\mathbb{P}^{(n)}$ sobre el espacio propio asociado a todos los $\lambda_k^{(n)}$ está bien definida y dada por

$$(2.1) \qquad \mathbb{P}^{(n)} = \frac{-1}{2\pi i}\int_\Gamma R_n(z)\,dz \quad ;$$

es inmediata la siguiente pregunta: ¿como cambia la dim($\mathbb{P}^{(n)}$) al aumentar n ?, la respuesta encierra el importante concepto de estabilidad de un autovalor aislado de $\mathbb{H}$ y es la clave para demostrar que las funciones porpias de los $\mathbb{H}_n$ convergen a las de $\mathbb{H}$.

§3. Convergencia a las funciones propias del operador $\mathbb{H}$

1. Autovalores estables del operador $\mathbb{H}$

Llegamos a la parte más importante de todo el trabajo, hagamos un resumen de las propiedades del espectro de los operadores $\mathbb{H}_n$

i) el espectro de cada $\mathbb{H}_n$ es puramente discreto, sin puntos de acumulación y acotado por abajo por la energía del estado base λ_0 de $\mathbb{H}$.

ii) la gráfica de cada autovalor $\lambda(r)$ como función del radio de la bola es continua, decreciente , con una asíntota horizontal y sobre cada gráfica la mutiplicidad de los autovalores permanece constante, salvo en los puntos donde se intersecten dos gráficas.

iii) Cada autovalor λ_k de $\mathbb{H}$ (punto del espectro de $\mathbb{H}$ con multiplicidad finita) es límite de una secuencia de autovalores $\{\lambda_k^{(n)}\}_n$ de la sucesión $\{\mathbb{H}_n\}$ y sólo un número finito de autovalores de cada $\mathbb{H}_n$ se aproxima a λ .

El concepto de estabilidad de un autovalor λ aislado y de multiplicidad finita del operador $\mathbb{H}$ resume lo que se esperaria que cumpliera una sucesión $\{\lambda_k^{(n)}\}_n$ de autovalores de los operadores $\mathbb{H}$ que converge a λ , en relación a la dimesión de la proyección $\mathbb{P}^{(n)}$ (2.1).

Def (3.1). Un autovalor λ aislado y de multiplicidad finita del operador $\mathbb{H}$ se llama ESTABLE si la sucesion $\{\lambda_k^{(n)}\}_n$ de autovalores de los operadores $\mathbb{H}_n$ que converge a λ satisface

i) existe una $\varepsilon>0$ para la cual el disco $D(\lambda,\varepsilon)$ aisla a λ de los demás puntos del espectro de $\mathbb{H}$, y la frontera del disco está contenida en el conjunto $\Delta_b \cap \rho(\mathbb{H})$. Esto permite que la sucesión de resolventes

$$R_n(z) = (\mathbb{H}_n - z)^{-1} \quad \text{y} \quad R(z) = (\mathbb{H} - z)^{-1} \quad , z \in \Gamma = \partial D(\lambda, \varepsilon).$$

esté bien definida en el círculo Γ apartir de una n_0 grande. Como sabemos, las singularidades de cada resolvente $R_n(z)$ son precisamente los autovalores de $\mathbb{H}_n$, y como hay un número finito de tales autovalores de $\mathbb{H}_n$ en el interior del círculo Γ entonces la integral

$$\mathbb{P}^{(n)} = \frac{-1}{2\pi i} \int_\Gamma R_n(z)\, dz \quad , \quad \mathbb{P} = \frac{-1}{2\pi i} \int_\Gamma R(z)\, dz$$

da la proyección $\mathbb{P}^{(n)}$ sobre el espacio propio asociado a todos los autovalores de $\mathbb{H}_n$ (número finito) que convergen a λ . Ya que Γ está contenida en $\Delta_b \cap \rho(\mathbb{H})$ entonces el teorema (1.3) afirma que

$$R_n(z) \xrightarrow{s} R(z) \quad \text{para cada } z \in \Gamma$$

lo que implica la convergencia fuerte de las proyecciones

$$\mathbb{P}^{(n)} \xrightarrow{s} \mathbb{P}$$

ii) hasta aquí no hemos pedido algo que no cumpla la sucesión

$\{\mathbb{H}_n\}$. La segunda condición de estabilidad es algo que es de esperarse

$$\dim \mathbb{P}^{(n)} \leq \dim \mathbb{P} \quad ;$$

es decir, el número de funciones propias asociadas al conjunto de valores propios de cada $\mathbb{H}_n$ que converge a λ no excede al número de funciones propias del autovalor λ de $\mathbb{H}$.

2. Gran Teorema de Convergencia

Ahora podemos enunciar el Gran Teorema de Convergencia a las funciones propias del operador $\mathbb{H}$.

Teorema (3.1). Si un autovalor λ de $\mathbb{H}$ es estable tenemos:

i) es aislado y de multiplicidad finita

ii) existe una sucesión de autovalores de los operadores $\mathbb{H}_n$ (compuesta por un número finito de autovalores $\{\lambda_k^{(n)}\}_{k=1}^{<\infty}$ de cada $\mathbb{H}_n$) que converge a λ

iii) la sucesión de proyecciones $\{\mathbb{P}^{(n)}\}$, $\mathbb{P}^{(n)}$ es la proyección asociada a cada conjunto $\{\lambda_k^{(n)}\}_k$ de autovalores de cada $\mathbb{H}_n$, converge fuertemente a la proyección $\mathbb{P}$ asociada a λ

iv) $\mathrm{Dim}\ \mathbb{P}^{(n)} \leq \mathrm{Dim}\ \mathbb{P}$

ENTONCES

1) las proyecciones $\{\mathbb{P}^{(n)}\}$ convergen a $\mathbb{P}$ en la <u>norma</u> de operadores

$$\lim \| \mathbb{P}^{(n)} - \mathbb{P} \| = 0$$

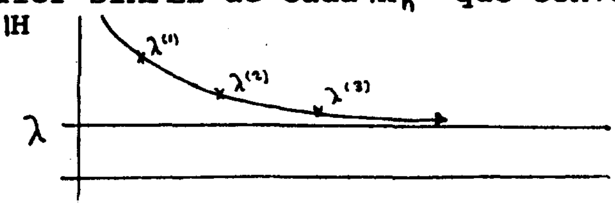
2) $\dim \mathbb{P}^{(n)} = \dim \mathbb{P}$ apartir de una n_0 grande ; y por tanto el conjunto de funciones propias asociadas los autovalores $\{\lambda_k^{(n)}\}_{k=1}^{<\infty}$ de $\mathbb{H}_n$ convergen a un conjunto de funciones propias del espacio propio asociado a λ .

Nota. Es importante observar que las hipótesis sólo involucran a los espectros de los operadores $\mathbb{H}$ y $\mathbb{H}_n$, para nada hemos mencionado si las funciones propias de la sucesion $\{\mathbb{H}_n\}$ convergen a las de $\mathbb{H}$ en algún sentido.

El Teorema (3.1) da un criterio que garantiza la convergencia de las funciones propias de los $\mathbb{H}_n$ a las de $\mathbb{H}$:

si se satisface $\dim \mathbb{P}^{(n)} \leq \dim \mathbb{P}$ entonces las funciones propias de $\{\mathbb{H}_n\}$ convergen en la norma de $L(R^m)$.

Hay un caso en el cual la estabilidad es trivial : supongamos que hay una ÚNICA sucesión de autovalores $\{\lambda^{(n)}\}$ compuesta por un solo autovalor SIMPLE de cada $\mathbb{H}_n$ que converge a un autovalor SIMPLE λ de $\mathbb{H}$

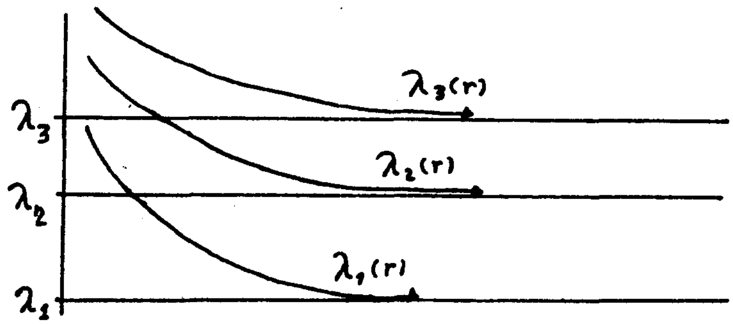


entonces se satisface trivialmente la segunda hipótesis de estabilidad y por tanto las funciones propias convergen a la funcion propia de λ .

Teorema (3.2). Supongamos que $\lambda \in \sigma(\mathbb{H})$ es simple y existe una <u>única</u> sucesión sucesion $\{\lambda^{(n)}\}$, compuesta por un autovalor simple $\lambda^{(n)} \in \sigma(\mathbb{H}_n)$ de cada $\mathbb{H}_n$ y con $\phi(x)$ y $\phi_n(x)$ la función propia de λ y $\lambda^{(n)}$ respectivamente. Entonces la sucesión $\{\phi_n(x)\}_n$ converge a $\phi(x)$ en la norma de $L2(R^m)$.

Hay dos tipos de problemas en el cual tenemos autovalores simples tanto de los operadores $\mathbb{H}_n$ como de $\mathbb{H}$:

1) para los operadores de Schröedinger sobre la recta tanto en $L2(-\infty,\infty)$ como en $L2(-n,n)$ $(n \in \mathbb{N})$ cada autovalor de $\mathbb{H}_n$ y $\mathbb{H}$ es simple entonces las gráficas $\lambda(r)$ NO SE INTERSECTAN, de lo contrario el punto de intersección tiene multiplicidad=2 lo cual es absurdo, por tanto basta con verificar que no hay dos sucesiones de autovalores $\{\lambda^{(n)}_k\}$ distintas que converjan al mismo límite en el espectro puntual de $\mathbb{H}$, lo que es equivalente a pedir que dos gráficas $\lambda_k(r)$ no tengan la misma asíntota



2) el segundo caso con autovalores simples corresponde al estado base de los operadores $\mathbb{H}_n$. Hay varias referencias en las que se muestra que el autovalor mínimo de cada operador $\mathbb{H}_{\Omega_n}$ en $L2(\Omega_n)$ es SIMPLE por tanto basta checar que la sucesión de autovalores minimos $\{\lambda^{(n)}_0\}$ converge al autovalor minimo λ_0 de $\mathbb{H}$ (que es simple en la mayoria de los casos de interes como son átomos y moléculas) y no hay otra sucesión que converja al mismo punto. Esto último puede verificarse numericamente lo que da un criterio numérico para GARANTIZAR la convergencia a la función propia del estado base de $\mathbb{H}$, como establece el Teorema (3.2).

VI OPERADORES DE SCHRÖEDINGER EN $L2(-\infty,\infty)$

§1. El operador $\mathbb{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$ en $L2(-\infty,\infty)$

En esta sección aplicamos la teoria desarrollada en el capítulo III para mostrar que los operadores con potencial continuo y acotado por abajo son esencialmente autoadjuntos.

Definimos la forma diferencial $\mathbb{L}$ como

(1.2) $$\mathbb{L}f = -\frac{d^2}{dx^2} f + q(x) f$$

donde el potencial q(x) satisface :

(1.2) i) es real valuado y continuo en R

ii) existe una constante $q_0 > -\infty$ para la cual se cumple $q(x) \geq q_0$ para cada $x \in R$.

El operador minimal $\mathbb{H}_0$ se define como

(1.3) $$D(\mathbb{H}_0) = C_0^\infty(-\infty,\infty) \quad , \quad \mathbb{H}_0 f = \mathbb{L} f \quad ;$$

es fácil mostrar que $\mathbb{H}_0$ es simétrico y acotado por abajo por q_0

$$q(x) \geq q_0 \quad , \quad \langle q f | f \rangle \geq q_0 \|f\|^2 \quad ,$$

$$\langle \tfrac{df}{dx}, \tfrac{df}{dx} \rangle + \langle q f, f \rangle = \langle \mathbb{H}_0 f, f \rangle \geq q_0 \|f\|^2 \; ;$$

para ver que $\mathbb{H}_0$ es esencialmete autoadjunto probaremos que q(x) pertenece a la familia $M_{\rho,loc}(R)$ con p>0 (§4.4-III) :

a) $0<\rho<1$: $M_{q,\rho}^2(x) = \int_{-1}^{1} |q(x-y)|^2 \, |y|^{\rho-1} dy$;

si $x \in [a,b]$ entonces $x-y$ es continua en $(x,y) \in [a,b] \times [-1,1]$ por tanto $|q(x-y)|^2$ es continua y acotada sobre $[a,b] \times [-1,1]$:

$$M_{q,\rho}^2(x) \leq C_{a,b}^2 \int_{-1}^{1} |y|^{\rho-1} dy = 2\, C_{a,b}^2 / \rho \qquad \text{para } x \in [a,b]$$

b) $\rho>1$: $M_{q,\rho}^2(x) \leq 2\, C_{a,b}^2 < \infty$ para $x \in [a,b]$

resumiendo, el potencia q(x) (1.2) satisface

a) $q(x) \in M_{\rho,loc}(R)$ para $\rho>0$

b) $q(x) \geq q_0$ para cada $x \in R$

por tanto el Teo. (4.7)-III nos dice que el operador minimal $\mathbb{H}_0$ (1.3) es esencialmete autoadjunto en L2(R).

(1.4) El operador $\mathbb{H}$ denotará al operador $\overline{\mathbb{H}_0}$, siendo la única extensión autoadjunta del operador minimal $\mathbb{H}_0$ tiene la propiedades siguientes

(1.5) i) es autoadjunto en L2(R) y $C_0^\infty(R)$ es un <u>core</u>

ii) es acotado por abajo por q_0: $\langle \mathbb{H}f, f \rangle \geq q_0 \|f\|^2$ para $f \in D(\mathbb{H})$

iii) $\mathbb{H}f(x) = \mathbb{L}f(x)$ para $f \in D(\mathbb{H})$, donde las derivadas son distribucionales .

§2. Teoría de Ecuaciones Diferenciales en $L2(-\infty,\infty)$

Con el objeto de dar una caracterización completa del espectro del operador $\mathbb{H}$ (1.4) aplicaremos la teoría de ecuaciones diferenciales para estudiar la ecuacion $(\mathbb{L}-z)u(x)=f(x)$ con $z\in\mathbb{C}$ y $f\in L2(R)$; de esta manera probaremos que los autovalores aislados de $\mathbb{H}$ (si existen) son simples y obtendremos una expresión explícita de la resolvente $R(z)=(\mathbb{H}-z)^{-1}$.

1. La ecuación diferencial $(\mathbb{L}-z)u(x)=0$

La continuidad del potencial $q(x)$ (1.2) permite probar que la ecuación diferencial homogénea

$$(2.1) \qquad (\mathbb{L}-z)\,u(x)=0$$

tiene un conjunto de soluciones que forma un espacio vectorial de dimensión 2; es decir, existe un conjunto fundamental formado por dos soluciones linealmente independientes $u_1(x),u_2(x)$ con las cuales cualquier solución de (2.1) es de la forma $u=c_1u_1+c_2u_2$ donde $c_1,c_2\in\mathbb{C}$. El wronskiano de $u_1(x)$ y $u_2(x)$

$$W(u_1,u_2)=u_1(x)\,u_2'(x)-u_2(x)\,u_1'(x)$$

nunca se anula para $x\in R$ por independencia lineal de u_1 y u_2 .

Nota. La teoría de ecuaciones diferenciales muestra que cada solución de (2.1) almenos tiene derivada continua (en el sentido clásico).

Consecuencia inmediata de la 2-dimensionalidad del espacio de soluciones de (2.1) es que si λ es un autovalor de $\mathbb{H}$ (1.4) entonces $(\mathbb{H}-\lambda)u=0$ tiene a lo más dos soluciones linealmente independientes por tanto la multiplicidad de λ es 1 ó 2.

2. La alternativa de Weyl y el caso punto límite (LPC)

Es claro que no toda solución de la ec. (2.1) pertenece a $L2(R)$ que es el espacio donde estamos trabajando, por ejemplo si $q(x)=0$ para $z\in R$ la ec. (2.1) tiene soluciones que no están en $L2(R)$. A este respecto el siguiente Teorema nos dice que sólo hay dos alternativas.

Teorema (2.1). Sea $c\in R$ finito y $z\in\mathbb{C}$, entonces sólo tenemos las alternativas :

i) caso LCC en $+\infty$: existe una $z_0\in\mathbb{C}$ para la cual la ec. $(\mathbb{L}-z_0)u=0$ tiene dos soluciones linealmente independientes en $L2(c,+\infty)$; en tal caso lo mismo se cumple para toda $z\in\mathbb{C}$.

ó

ii) caso LPC en $+\infty$: existe una $z_0\in C$ para la cual $(\mathbb{L}-z_0)u=0$ tiene a lo más una solución (salvo factor constante) en $L2(c,+\infty)$. En este caso la ec. $(\mathbb{L}-z)u=0$ para $z\in C\backslash R$ tiene exactamente una solución en $L2(c,+\infty)$.

De manera análoga se establecen los casos LCC y LPC en $-\infty$.

Nota. El teorema anterior establece las dos únicas alternativas que tiene las soluciones de (L-z)u=0 en cuanto a pertenecer o no a L2(c,+∞), y es claro que si tenemos el caso LPC entonces a lo más hay una solución en L2(R), ya que L2(c,+∞)⊂L2(R).

El lema siguiente da un criterio que caracteriza el caso LPC en ±∞.

Lema 1. Si el potencial q(x) satisface

i) es real valuado y continuo

ii) existe una $k\geq 0$ tal que se cumple $q(x)\geq -kx^2$ para cada $x\in R$

Entonces tenemos el caso LPC en ±∞ .

Aplicando el lema anterior al potencial $q(x)-q_0\geq 0$ (1.2) tenemos el

Corolario (2.1). Para los potenciales (1.2)

i) tenemos el caso LPC en ±∞

ii) si λ es un autovalor entonces $(\mathbb{H}-\lambda)u=0$ tiene a lo más una solución en L2(R); es decir, λ es simple.

Nótese que la teoría anterior da una respuesta completa sobre la multiplicidad de los autovalores del operador $\mathbb{H}$: todos son simples.

3. La ecuación Diferencial $(\mathbb{L}-z)u=f$ y la Resolvente $(\mathbb{H}-z)^{-1}$

Para hallar la forma explícita de la resolvente del operador $\mathbb{H}$ (1.4) debemos resolver la ecuación diferencial en u(x)

$$(3.1)\qquad (\mathbb{L}-z)u(x)=f(x)$$

para $z\in\rho(\mathbb{H})$,$f\in L2(R)$ y con la condición $u(x)\in L2(R)$. Si conocemos dos soluciones linealmete independientes $u_1(x)$ y $u_2(x)$ de la ec. $(\mathbb{L}-z)u=0$ la solución general de (3.1) es

$$(3.2)\qquad u(x)=c_1u_1(x)+c_2u_2(x)+u_1(x)\int_c^x\frac{u_2(y)f(y)}{W(u_1,u_2)}dy-u_2(x)\int_c^x\frac{u_1(y)f(y)}{W(u_1,u_2)}dy\,,\ c\in R;$$

pero la condición $u(x)\in L2(R)$ restringe las soluciones de $(\mathbb{L}-z)u=0$ que puedan dar la dicha condición, además los terminos $c_ku_k(x)$ evitan que (3.2) defina un operador. Para resolver este problema recurrimos a la función de Green G(x,y) con la cual se obtiene una solución particular u(x) de (3.1) que satisface la condiciones de frontera $u(\pm\infty)=0$ y que permiten a u(x) pertenecer a L2(R); el método para calcular G(x,y) es bien conocido .

Teorema (2.2). Para cada $z\in\mathbb{C}\backslash R$ la resolvente R(z) del operador $\mathbb{H}$ (1.4) tiene la forma

$$R_z f(x)=W(u_{-\infty},u_\infty)^{-1}\left\{u_\infty(x)\int_{-\infty}^x u_{-\infty}(y)f(y)dy+u_{-\infty}(x)\int_x^{+\infty}u_\infty(y)f(y)dy\right\}$$

o usando la función de Green G(x,y)

$$G_z(x,y)=\begin{cases}W(u_{-\infty},u_\infty)\ u_\infty(x)\ u_{-\infty}(y) & x\geq y\\ W(u_{-\infty},u_\infty)\ u_{-\infty}(x)\ u_\infty(y) & x<y\end{cases}$$

tenemos

$$R(z)f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x,y) f(y) dy$$

donde $u_{-\infty}(x)$, $u_{+\infty}(x)$ son soluciones de $(\mathbb{L}-z)u=0$ que pertenecen a $L2(-\infty,c)$ y $L2(c,+\infty)$ respectivamente (existen y son únicas salvo por una constante según Teo. (2.1)-ii).

---

§3. Espectro del operador $\mathbb{H}: L2(\mathbb{R}) \circlearrowleft$

Del Corolario (2.1) se obtiene el

Teorema (3.1). Para los potenciales (1.2), los autovalores (si existen) del operador $\mathbb{H}$ (1.4) son simples.

En esta sección daremos algunos criterios que garantizan la existencia de autovalores del operador $\mathbb{H}$.

1. Espectro puramente puntual

Teorema (3.2). Si el potencial (1.2) satisface

$$\lim_{|x|\to\infty} \int_x^{x+h} q(t)\, dt = +\infty \qquad \text{para cada } h\text{-fija} \in (0,1)$$

Entonces el espectro del operador $\mathbb{H}$ (1.4) es discreto.

Ejemplos típicos son x^2, x^{2n}, $x^2+x^2/(1+x^4)$, e^{x^2} .

2. Espectro esencial y existencia de autovalores

En muchos casos el operador $\mathbb{H}$ tiene un espectro continuo por lo que es importante saber cuando tiene autovalores aislados.

Teorema (3.2). Si el potencial $q(x)$ (1.2) satisface

i) existe una constante b con la cual existe la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} [q(x)-b]\, dx = \gamma < \infty$$

ii) $$\sup_{-\infty<x<\infty} \int_x^{x+|w|} |q(t)|\, dt = \Theta(1) \qquad \text{para } |w| \text{ muy pequeño}$$

Entonces

1) $\sigma_e(\mathbb{H}) = [b,+\infty)$

2) si $\gamma<0$ entonces el operador $\mathbb{H}$ tiene almenos un autovalor abajo de b.

Ejemplo. Para $q(x)=-e^{-x^2}$, si b=0 tenemos

$$\mathbb{H} = -\frac{d^2}{dx^2} - e^{-x^2} \quad ; \quad \int_{-\infty}^{\infty} -e^{-x^2} dx = -\sqrt{\pi}$$

por tanto $\mathbb{H}$ tiene almenos un autovalor en $(-1,0)$ ya que -1 es una cota inferior de $\mathbb{H}$ y $\sigma_e(\mathbb{H})=[0,+\infty)$.

El caso más sencillo para localizar al espectro discreto (si existe) es cuando el potencial $q(x)$ (1.2) es relativamente compacto (Teo. 4.6-III), en tal caso el Teo. (4.4)-III afirma

que
$$\sigma_e[-\frac{d^2}{dx^2}] = \sigma_e[-\frac{d^2}{dx^2}+q(x)] = [0,+\infty)$$
por tanto si $\mathbb{H}$ (1.4) tiene autovalores estos se localizan en la parte inferior del espectro (abajo de $[0,+\infty)$) y son simples; el siguiente teorema da algunos casos en los que esto acurre.

Teorema (3.4). Si el potencial (1.2) satisface

i) es relativamente compacto: $q(x)\in M_\rho(R)$ para alguna $\rho<4$ y
$$\lim_{|x|\to\infty}\int_{-1}^{1}|q(x-y)|^2dy = 0 \qquad \left(\lim_{|x|\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|q(x-y)-b|^2dy=0\right)$$
ii) existen constantes $r,C\geq 0$ y $\varepsilon>0$ tales que
$$q(x) \leq -C|x|^{-2+\varepsilon} \qquad \text{para } |x|\geq r$$
Entonces el operador $\mathbb{H}$ (1.4) tiene infinitos autovalores que se acumulan en cero (en b) y $\sigma_e(\mathbb{H})=[0,+\infty)$ ($\sigma_e(\mathbb{H})=[b,+\infty)$).

Ejemplo $q(x)=-e^{-x^2}$

i) $\displaystyle\lim_{|x|\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}-e^{-(x-y)^2}dy=0$

ii) C=r=0, $q(x)=-e^{-x^2}\leq 0$ por tanto $\mathbb{H}$ tiene infinitos autovalores simples en el intervalo (-1,0) que se acumulan en cero.

Nota. Los criterios dados por teoremas (3.2),(3.3) y (3.4) no son los únicos , hay otros que aprovechan el carácter ordinario del operador $\mathbb{H}$ (1.4).

Nota. En los casos establecidos por los Teoremas (3.2),(3.3) y (3.4) el espectro puntual siempre está en la parte inferior de $\sigma(\mathbb{H})$ y consta de autovalores simples lo que permite mostrar numéricamente que son estables según el Teo. (3.2)-V y por tanto podemos calcular las funciones propias a partir de la solución de la ecuacion de valores propios en L2(-n,n).

\$4 El operador $\mathbb{H}^1_n=-\frac{d^2}{dx^2}+q(x)$ en L2(-n,n)

1. Extensión de Friedrichs del operador minimal $\mathbb{H}^\circ_n$

Notación. Al referirnos a un espacio de Hirbert en el intervalo [-n,n] escribiremos X(n), por ejemplo L2(n).

El operador minimal $\mathbb{H}^\circ_n$ sobre L2(n) inducido por la forma diferencial $\mathbb{L}$ (1.1) es

(4.1) $\qquad D(\mathbb{H}^\circ_n)=C_0^\infty(n) \quad , \quad \mathbb{H}^\circ_n f=\mathbb{L}f$

y para el potencial q(x) (1.2), $\mathbb{H}^\circ_n$ es simétrico en L2(n) y acotado por abajo por q_0, la prueba es idéntica a la de $\mathbb{H}_0$ (1.3).

La forma sesquilineal h°_n inducida por el operador minimal $\mathbb{H}^\circ_n$ es

(4.2) $\qquad D(h^\circ_n)=D(\mathbb{H}^\circ_n) \;;\; h^\circ_n(u,v)=\langle\mathbb{H}^\circ_n u,v\rangle=\langle\frac{du}{dx},\frac{dv}{dx}\rangle+\langle q(x)u,v\rangle$

y para el potencial q(x) (1.2) tiene las propiedades siguientes

i) es simétrica en L2(n)

ii) es acotada por abajo por q_0

iii) es acotada en la norma $\|\cdot\|_1$:

$$|q(x)| \leq \max_{x\in[-n,n]} |q(x)| = q_{max} \rightarrow |\langle qu,u\rangle| \leq q_{max}\|u\|^2 \leq q_{max}\|u\|_1^2$$

$$|h_n^0(u,v)| \leq \|\frac{du}{dx}\| + |\langle qu,u\rangle| \leq (1+q_{max})\|u\|_1^2 \;;$$

de estas propiedades se desprende que $h_n^0(.,.)$ puede extenderse a todo el espacio $(W_1^0(n),\langle.,.\rangle_1)$.

La forma sesquilineal $h_n^1(.,.)$ sobre L2(n) denotará la cerradura de $h_n^0(.,.)$ y está dada por

$$(4.3)\quad D(h_n^1) = W_1^0(n) \quad , \quad h_n^1(u,v) = \langle \frac{du}{dx},\frac{dv}{dx}\rangle + \langle qu,v\rangle$$

donde las derivadas son distribucionales.

El corolario (5.7)-III afirma que la forma $h_n^1(.,.)$ con las propiedades mencionadas arriba define un operador autoadjunto que es la extensión de Friedrichs de operador minimal $\mathbb{H}_n^0$ (4.1).

(4.4) El operador $\mathbb{H}_n^1$ denotará la extensión de Friedrichs del operador minimal $\mathbb{H}_n^0$ (4.1) y es definido por la forma $h_n^1(.,.)$ como sigue :

i) $D(\mathbb{H}_n^1) \subset W_1^0(n)$; si $u\in D(\mathbb{H}_n^1)$ y $v\in W_1^0(n)$ entonces

$$h_n^1(u,v) = \langle \mathbb{H}_n^1 u, v\rangle$$

para cada $u\in D(\mathbb{H}\;)$ y $v\in W_1^0(n)$

ii) si $w\in L2(n)$, $u\in W_1^0(n)$ y se satisface

$$h_n^1(u,v) = \langle w,v\rangle \quad \text{para cada } v\in W_1^0(n)$$

entonces $u\in D(\mathbb{H}_n^1)$ y $w=\mathbb{H}_n^1 u$.

Para mostrar que la resolvente del operador $\mathbb{H}_n^1$ es compacta en L2(n) basta con probar que $h_n^1(.,.)$ es coerciva y por tanto h_n^1-b es elíptica para una b apropiada.

2. Elipticidad de h_n^1-b y compacidad de la resolvente $(\mathbb{H}_n^1-b)^{-1}$

Para el potencial q(x) (1.2) es fácil probar la coercividad (Def. (2.3) ,IV) de la forma $h_n^1(.,.)$

$$q(x)\geq q_0 \rightarrow h_n^1(u,u) \geq \|\frac{du}{dx}\|^2 + q_0\|u\|^2 \rightarrow$$

$$h_n^1(u,u) - b\langle u,u\rangle \geq \alpha\|u\|_1^2 \quad \text{para } C>0,\ b=q_0-C\ ,\alpha=\min\{1,C\}$$

por tanto h_n^1-b es elíptica para $b<q_0$, de lo cual se desprende que la solucion débil $u(x)\in W_1^0(n)$ al problema de Dirichlet (Def. (2.2),IV)

$$(\mathbb{H}_n^1 - b)u = f \qquad , \quad u(-n) = u(n) = 0$$

existe y es única para cada $f(x)\in L2(n)$, y satisface

$$h_n^1(u,v) - b\langle u,v\rangle = \langle f,v\rangle \quad \text{para cada } v\in W_1^0(n)\;,$$

según afirma el Teo. (2.2)-IV.

El teorema de regularidad (2.3)-IV es válido lo que da el

Teorema (4.1). Para el potencial $q(x)$ (1.2) tenemos

i) el operador $\mathbb{H}_n^1$ (4.4) está dado por

$$D(\mathbb{H}_n^1) = W_1^\circ(n) \cap W_2(n) \quad , \quad \mathbb{H}_n^1 f = \mathbb{L} f$$

donde las derivadas se entienden como distribuciones.

ii) la resolvente $R_n^1(b)=(\mathbb{H}_n^1-b)^{-1}$ es un operador compacto y autoadjunto sobre L2(n)

iii) la restricción de la resolvente a $W_1^\circ(n)$ es un operador $R_n^{(2)}(b)$ compacto y autoadjunto en $(W_1^\circ(\pi),<.,.>_1)$

iv) el espectro de $\mathbb{H}_n^1$ se compone de autovalores aislados, de multiplicidad finita, acotados por abajo por q_0 y sin puntos de acumulación

v) las funciones propias de $\mathbb{H}_n^1$ pertenecen a $C^\infty(-n,n)$, satisfacen la condición de frontera $u(-n)=u(n)=0$ y forman una base de L2(n) y $W_1^\circ(n)$.

$5. Teoria de ecuaciones diferenciales en L2(-n,n)

Como en $2, aplicaremos la teoría de ecuaciones diferenciales para dar una caracterización más precisa del operador $\mathbb{H}_n^1$ (4.4) y veremos como definir otras extensiones del operador minimal $\mathbb{H}_n^\circ$ (4.1).

1. Extensiones autoadjuntas del operador minimal $\mathbb{H}_n^\circ$

Con la forma diferencial $\mathbb{L}$ (1.1) definimos el operador

(5.1) $D(T)=\{f \in L2(n) \mid$ f es continuamente diferenciable y f' es absolutamente convergente $\}$

$$Tf = \mathbb{L} f$$

el cual es una extensión del operador minimal $\mathbb{H}_n^\circ$ ya que

$$D(T) \supset D(\mathbb{H}_n^\circ) \quad y \quad Tf = \mathbb{H}_n^\circ f \quad \text{para } f \in D(\mathbb{H}_n^\circ) ,$$

pero no es simétrico debido a que

(5.2) $\langle Tf, g\rangle = \langle f, Tg\rangle + [f,g]_n - [f,g]_{-n}$

donde

$$[f, g]_x = f'(x)^* g(x) - f(x)^* g'(x)$$

es distinto de cero en general.

Es claro que para cualquier extensión autoadjunta T_α del operador minimal $\mathbb{H}_n^\circ$ los elementos del dominio $D(T_\alpha)$ almenos deben satisfacer

(5.3a) $\quad [f,g]_n = [f,g]_{-n} \quad$ ó

(5.3b) $\quad [f,g]_n = 0 \quad y \quad [f,g]_{-n} = 0$

ya que T_α es simétrico (ec. 5.2). El Teorema siguiente afirma que las condiciones de frontera (5.3b) son suficientes para definir una extensión autoadjunta del operador minimal $\mathbb{H}_n^\circ$.

Teorema (5.1) . La fórmula

(5.4) $D(T_{\alpha,\beta}) = \{ f \in D(T) \mid f(-n)\cos\alpha - f'(-n)\operatorname{sen}\alpha = 0 \text{ y } f(n)\cos\beta - f'(n)\operatorname{sen}\beta = 0 \}$

$$T_{\alpha,\beta}\, f = \mathbb{L} f$$

define una extensión autoadjunta del operador minimal $\mathbb{H}_n^\circ$ (4.1) para α, β en $[0,\pi)$ arbitrarios. En particular si $\alpha=\beta=0$ tenemos la extensión de Friedrichs $\mathbb{H}_n^1$ (4.4).

Nota. Este teorema muestra que en regiones acotadas el operador minimal $\mathbb{H}_n^\circ$ tiene infinitas extensiones autoadjuntas que dependen de las condiciones de frontera que se impongan, a diferencia del operador minimal $\mathbb{H}_0$ (1.3) en L2(R) que sólo tiene una extensión autoadjunta.

2. La ecuación diferencial $(\mathbb{L}-z)u=f$ en L2(-n,n) y la resolvente $R_n^1(b)=(\mathbb{H}_n^1-z)^{-1}$

La ecuación diferencial homogénea

$$(\mathbb{L}-z)u=0$$

siempre tiene 2 soluciones linealmente independientes en L2(n) ya que $[-n,n]$ es un intervalo compacto y las soluciones pueden extenderse continuamente en dicho intervalo, esto contrasta con la misma ecuación en toda la recta para la cual a lo más una solución (salvo una constante) está en L2(R) (caso LPC).

Conocidas dos soluciones linealmente independientes $u_1(x)$ y $u_2(x)$ de $(\mathbb{L}-z)u=0$ la solución general de

$$(\mathbb{L}-z)u=f$$

está dada por nuevamente por (3.2).

Supongamos que $f(x)$ está en el rango de $T_{\alpha,\beta}-z$ (donde $T_{\alpha,\beta}$ es una extensión autoadjunta de $\mathbb{H}_n^\circ$ según Teo. (5.1)) y $z\in\rho(T_{\alpha,\beta})$ entonces

$$(T_{\alpha,\beta}-z)u=f \quad \text{si y sólo si} \quad u=(T_{\alpha,\beta}-z)^{-1}f=R_{\alpha,\beta}(z)f$$

por tanto para encontrar una expresion de la resolvente $R_{\alpha,\beta}(z)$ debemos resolver la ecuación en $u(x)$

$$(\mathbb{L}-z)u=f$$

sujeta a las condiciones de frontera

(5.5a) $u(-n)\cos\alpha - u'(-n)\operatorname{sen}\alpha = 0$

(5.5b) $u(n)\cos\beta - u'(n)\operatorname{sen}\beta = 0$

para garantizar $u(x)\in D(T_{\alpha,\beta})$. La solución a este problema la da nueavamente la funcion de Green $G_z(x,y)$.

Teorema (5.2). Para cada $z\in\rho(T_{\alpha,\beta})$ la resolvente $R_{\alpha,\beta}(z)=(T_{\alpha,\beta}-z)^{-1}$ tiene la forma

$$R_{\alpha,\beta}(z)f(x)=W(u_{-n},u_n)\left\{\int_{-n}^{x}u_n(x)u_{-n}(y)f(y)\,dy+\int_{x}^{n}u_{-n}(x)\,u_n(y)f(y)\,dy\right\}$$

o usando la función de Green

$$G_{\alpha,\beta}(x,y) = \begin{cases} W(u_{-n},u_n)^{-1}\, u_n(x)\, u_{-n}(y) & x\geq y \\ W(u_{-n},u_n)^{-1}\, u_{-n}(x)\, u_{n}(y) & x < y \end{cases}$$

tenemos

$$(5.6) \qquad R_{\alpha,\beta}(z)f(x)=\int_{-n}^{n} G_{\alpha,\beta}(x,y)\,f(y)\,dy$$

donde $u_{-n}(x), u_n(x)$ son soluciones de $(L-z)u=0$ que satisfacen las condiciones de frontera (5.5a) y (5.5b) respectivamente.

Nota. Apartir de la ecuación (5.6) en el ejemplo 3 ($6,III) se da una prueba directa de la compacidad de la resolvente $R_{\alpha,\beta}(z)$ lo que confirma la teoría de problemas con valores en la frontera basada en el concepto de solución débil.

$6. Espectro del operador $\mathbb{H}_n^1: L2(-n,n)\circlearrowleft$

La compacidad de la resolvente $R_n^1(b)=(\mathbb{H}_n^1-z)^{-1}$ da varias propieades del espectro de $\mathbb{H}_n^1$ (Teo. (4.1)-iv) pero no dice que multiplicidad tienen los autovalores, para lo cual aplicaremos la teoría de acuaciones diferenciales.

Si λ es un autovalor de $\mathbb{H}_n^1$ entonces existen a lo más dos soluciones linealmente independientes de la ecuación

$$(\mathbb{H}_n^1-\lambda)\,u=0$$

sujeta a las condiciones de frontera

$$u(-n)=u(n)=0 \quad ,$$

pero sólo puede haber una solución a este problema de lo contrario la resolvente (5.6) estaria bien definida en λ .

Teorema (6.1). El espectro del operador $\mathbb{H}_n^1$ (4.4) consiste de autovalores aislados , sin puntos de acumulación y de multiplicidad=1 (simples).

Con esto terminamos por dar una caracterización completa del operador de Schrödinger $\mathbb{H}_n^1$ en L2(n).

$7. Solucion de $-\frac{d^2u}{dx^2}+qu=\lambda u$ en $L2(-\infty,\infty)$

---

1. La sucesión $\{\mathbb{H}_n\}$

El operador $\mathbb{H}_n$ ($1.1, V) define como la suma directa del operador $\mathbb{H}_n^1$ (4.4) y el operador cero

$$D(\mathbb{H}_n) = \{\, f\in L2(R) \mid P_n f\in D(\mathbb{H}_n^1) \text{ y } P_n^{\perp} f\in D(\Theta) \,\}$$

$$\mathbb{H}_n f = \mathbb{H}_n^1 P_n f + 0\, P_n^{\perp} f = \mathbb{H}_n^1 P_n f \quad ,$$

donde $P_n, P_n^{\perp}$ son las proyecciones sobre $L2(n), L2(n)^{\perp}$ respectivamente y según afirma el Teo. (1.1)- V, $\mathbb{H}_n$ tiene las propiedades siguientes

i) es autoadjunto en L2(R)

ii) $\sigma(\mathbb{H}_n)=\sigma(\mathbb{H}_n^1)\cup\{0\}$

iii) cada función propia de $\mathbb{H}_n^1$ es una función propia de $\mathbb{H}_n$ con el mismo autovalor,por tanto cada autovalor de $\mathbb{H}_n$ (salvo el cero) es simple y aislado.

En $1.3-V mostramos que la sucesión $\{\mathbb{H}_n\}$ converge en el sentido generalizado fuerte al operador $\mathbb{H}$ (1.4) ya que $C_0^\infty(R)$ es un core de $\mathbb{H}$.

2. Estabilidad del espectro puntual de $\mathbb{H}$

Para mostrar la estabilidad del espectro puntual de $\mathbb{H}$ aplicamos el Teo. (3.2)-V según el cual basta con mostrar que no ahy dos sucesiones de autovalores $\{\lambda_K^{(n)}\}$ que converjan al mismo punto en el espectro puntual de $\mathbb{H}$.

3. Solución numérica de $\mathbb{H}_n^1 u=\lambda u$ en L2(-n,n)

Según probamos en $5-IV la compacidad de la resolvente del operador $\mathbb{H}_n^1$ en L2(n) garantiza que las soluciones de la ecuación matricial

$$(7.1) \qquad \sum_{j=1}^{N} \left(\langle\hat{\phi}_i|\mathbb{H}_n^1|\hat{\phi}_j\rangle - \lambda\,\delta_{ij}\right) u_j^{(N)} = 0 \qquad 1\le i\le N$$

, donde $\{\hat{\phi}_j\}$ es un base ortonormal de $D(\mathbb{H}_n^1)$, convergen a las soluciones del problema

$$\mathbb{H}_n^1\, u = \lambda u \qquad u(-n) = u(n) = 0$$

y sólo a ellas cuando la base aumenta ($N\to\infty$).

Recordemos que en L2(n) tenemos :

$$\langle f,g\rangle = \int_{-n}^{n} f^* g\, dx \quad , \ \|f\| = \langle f,f\rangle^{1/2} \ \ \text{y} \ \ d(f,g) = \|f-g\|$$

donde la última igualdad define la distancia entre dos elementos de L2(n).

Selección de la base. La base más sencilla en dominio $D(\mathbb{H}_n^1)$ es

$$(7.2) \qquad \phi_j(x) = e^{-x^2/2}\,(n^2 - x^2)\, x^{j-1} \qquad , \ j = 1, 2, \ldots$$

donde introducimos el factor $e^{-x^2/2}$ porque que da el comportamiente correcto en $\pm\infty$ de las funciones propias de $\mathbb{H}$ (1.4).

Con el producto interior de L2(n) aplicamos el método de Gram-Schmidt para obtener una base ortonormal (B.O.N.) $\{\hat{\phi}_j\}$ apartir de $\{\phi_j\}$. El espacio generado por $\{\hat{\phi}_j\}_{j=1}^{N}$ lo denotamos por E_N.

Con la base ortonormal $\{\hat{\phi}_j\}$ en E_N resolvemos la ecuación matricial

$$(7.3) \qquad \sum_{j=1}^{N} \left(\langle\hat{\phi}_i|\mathbb{H}_n^1|\hat{\phi}_j\rangle - \lambda^{(N)}\delta_{ij}\right) u_j^{(N)} = 0 \qquad 1\le i\le N$$

de la cual se obtiene un conjunto de valores y vectores propios $\{\lambda^{(N)}\}$ y $\{u^{(N)}\}$ que forman una sucesión al aumentar el tamaño de la base ($N\to\infty$).

Convergencia del espectro. Las formas cuadráticas entre espacios consecutivos E_N y E_{N+1}

$$h^{(N)}(u,u) = \sum_{i,j=1}^{N} u_i^{(N)*}\,\langle\phi_i|\mathbb{H}_n^1|\phi_j\rangle\, u_j^{(N)}$$

satisfacen

$$h^{(N)}(u,u) \ge h^{(N+1)}(u,u) \quad \text{para} \quad u\in E_N$$

por tanto la sucesión de autovalores $\{\lambda^{(N)}\}$ es CONVERGENTE y DECRECIENTE

$$\lambda^{(N)}-\lambda^{(N+1)} > \lambda^{(N+1)}-\lambda^{(N+2)} > \dots \geq 0$$

de manera que cuanto mas pequeña es la diferencia $\lambda^{(N)}-\lambda^{(N+1)}(>0)$ más preciso el el autovalor $\lambda^{(N+1)}$.

Convergencia de autovectores. Como la sucesión de autovalores $\{u^{(N)}\}$ converge al autovalor $\lambda^{(N)}$ de $\mathbb{H}_n^1$ entonces las funciones propias respectivas satisfacen

$$\lim_N \| u^{(N)} - u \| = 0$$

lo que es equivalente a que $\{u^{(N)}\}$ se una sucesión de Cauchy

$$\lim_N \| u^{(N)} - u^{(N+1)} \| = 0$$

por tanto cuanto más pequeña es la distancia

$$\| u^{(N)} - u^{(N+1)} \|$$

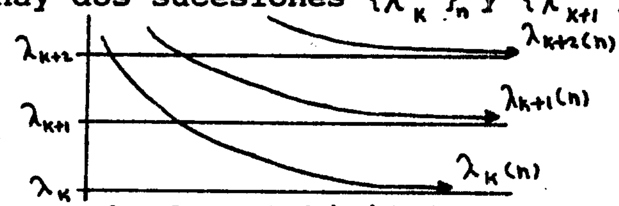
entre funciones consecutivas más precisa será $u^{(N+1)}$.

4. Solución numérica de $\mathbb{H}u=\lambda u$ en $L2(-\infty,\infty)$

Convergencia de autovalores. En los ejemplos númericos que damos se observa que los autovalores $\lambda_K^{(n)}(H_n^1)$ forman una sucesión decreciente de Cauchy

$$\lim_n \lambda_K^{(n)} - \lambda_K^{(n+1)} = 0$$

y no hay dos sucesiones $\{\lambda_K^{(n)}\}_n$ y $\{\lambda_{K+1}^{(n)}\}_n$ con el mismo límite



lo que prueba la estabilidad del espectro puntual de $\mathbb{H}$ y garantiza la convergencia de las funciones propias.

Convergencia de funciones propias. Aqui debemos recordar que cada función propia $u^{(N)}(x)$ de $\mathbb{H}_N$ se define como cero fuera del intervalo [-n,n] (ecuación (1.1), $1.1-V) de manera que la distancia entre $u^{(N)}$ y $u^{(N+1)}$ es

$$\| u^{(N)} - u^{(N+1)} \|^2_{L_2(R)} = \int_{-N}^{N} |u^{(N)}(x)|^2 dx - 2\int_{-N}^{N} u^{(N)} u^{(N+1)} \, dx + \int_{-N-1}^{N+1} |u^{(N+1)}|^2 dx$$

donde suponemos que $u^{(N)}$ y $u^{(N+1)}$ están normalizadas en la norma de L2(R)

$$\| u^{(N)} \|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |u^{(N)}(x)|^2 dx = \int_{-N}^{N} |u^{(N)}(x)|^2 dx = 1$$

por tanto

$$\| u^{(N)} - u^{(N+1)} \| = \{ 2(1 - \langle u^{(N)}, u^{(N+1)} \rangle \}^{1/2} \quad , \langle u^{(N)}, u^{(N+1)} \rangle = \int_{-N}^{N} u^{(N)} u^{(N+1)} dx$$

y cuanto más pequeña es esta distancia más precisa es $u^{(N)}$.

En el caso del oscilador armonico comparamos las soluciones numericas con las exactas (normalizadas)

$$\| u^{(N)} - u_{exac} \| = \left\{ 2\left(1 - \int_{-N}^{N} u^{(N)} u_{exac} \, dx\right) \right\}^{1/2}.$$

5. Ejemplos numericos

Oscilador armónico. $\mathbb{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2$

Tabla 1. Convergencia del espectro, r/2=longitud del intervalo, b=número de funciones base

estado	r=4,b=8	r=5,b=9	r=6,b=10	exac
1	1.000001	1.0000000002	1.000000000000	1.0
2	3.00003	3.000000008	3.000000000000	3.0
3	5.0004	5.0000002	5.00000000002	5.0
4	7.003	7.000003	7.0000000003	7.0

Tabla 2. Convergencia de funciones propias. El primer subíndice de $u_{r,b}$ corresponde al radio y el segundo al tamaño de la base

estado	$\|u_{4,8} - u_{5,9}\|$	$\|u_{5,9} - u_{6,10}\|$	$\|u_{6,10} - u_{7,11}\|$	$\|u_{7,11} - u_{8,12}\|$
1	.0002	.0000002	.00000002	.0000000001
2	.001	.00002	.0000001	.0000000006
3	.004	.00008	.0000008	.000000006
4	.01	.0003	.000003	.00000002

Tabla 3. Comparación con las soluciones extactas. El significado de los sibíndices es el mismo de la Tabla 2.

estado	$\|u_{4,8} - u_{exac}\|$	$\|u_{5,9} - u_{exac}\|$	$\|u_{6,10} - u_{exac}\|$	$\|u_{7,11} - u_{exac}\|$
1	.0002	.000002	.00000002	.00000000009
2	.001	.00001	.0000001	.0000000006
3	.004	.00007	.0000008	.000000006
4	.01	.0003	.000003	.00000002

Potencial de Mitra. $\mathbb{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \{ 1 + \frac{0.1}{1+2x^2} \}$

Tabla 1. Convergencia del espectro. r/2= longitud del intervalo y b=tamaño de la base

r,b	estado 1	estado 2	estado 3
2,4	1.09	3.6	6.8
3,6	1.017 9	3.032 8	5.1
4,8	1.017 181	3.032 765	5.034 84
5,10	1.017 180 29	3.032 765 79	5.034 442 0
6,12	1.017 180 291	3.032 765 794 7	5.034 441 87
7,14	1.017 180 290 8	3.032 765 794 01	5.034 441 872

Tabla 2. Convergencia de funciones propias, $\|u_k - u_{k+1}\|$ es la distancia entre funciones de intervalos consecutivos comenzando de r/2=2 y con las mismas bases de Tabla 1.

estado 1 $\|u_k - u_{k+1}\|$	estado 2 $\|u_k - u_{k+1}\|$	estado 3 $\|u_k - u_{k+1}\|$	estado 4 $\|u_k - u_{k+1}\|$
.10	.3	.6	.8
.007	.03	.1	.2
.000 2	.001	.004	.01
.000 007	.000 02	.000 07	.000 3
.000 004	.000 003	.000 006	.000 005

Fernádez reporta en su artículo Int. J. Quant. C. vol. 37 (1990) las siguientes cotas para la energía del estado base

$$1.017\ 180\ 297 \leq \lambda_0 \leq 1.017\ 180\ 304 \quad .$$

En este capítulo abordamos el problema de calcular las funciones propias del operador de Schröedinger sobre $L2(R^{3N})$ con $N\geq 1$

$$\mathbb{H} = \sum_{i=1}^{N}\left(p_i^2 + \frac{a_i}{|x_i|}\right) + \sum_{i<j}^{N} \frac{b_{ij}}{|x_i - x_j|} \qquad , a_i\ , b_{ij} \in R_e$$

donde $x_i \in R^3$ y p_i son las coordenadas y el momento respectivamente de la i-ésima partícula, a_i y b_{ij} son constantes. Las constantes físicas son irrelevantes para las propiedades que estudiamos.

Todo el problema se reduce a probar que la interacción coulombiana es un operador relativamente compacto respecto al operador de energía cinética, apartir de lo cual se muestra que las funciones propias en regiones acotadas (las cuales podemos calcular con la precisión deseada) convergen en la norma de $L2(R^{3N})$ a las funciones propias del operador $\mathbb{H}$ mencionado arriba.

1. Esencial autoadjuntes del operador de Schröedinger en $L2(R^{3N})$ y compacidad relativa de la interacción coulombiana

El operador de enegía cinética $T_0 : L2(R^{3N})\circlearrowleft$ dado por

$$(1.1) \qquad D(T_0) = C_0^\infty(R^{3N}) \qquad , T_0 = \sum_{i=1}^{N} p_i^2 = -\Delta$$

es esencialmente autoadjunto, acotado por abajo y carece de autovalores (ver Teo. (2.3) y ejemplo 7 de $2.2,III).

La interacción coulombiana dada por

$$(1.2) \qquad Q = \sum_{i=1}^{N} \frac{a_i}{|x_i|} + \sum_{i<j}^{N} \frac{b_{ij}}{|x_i - x_j|}$$

es una suma finita de terminios análogos y como $M_\rho(R^{3N})$ es un espacio vectorial, basta probar que

$$q(x_1, x_2) = |x_1 - x_2|^{-1}$$

pertenece a $M_\rho(R^{3N})$ para alguna $\rho<4$ para que $Q\in M_{\rho<4}(R^{3N})$. En cualquiera de las integrales

$$\int_{|x-y|\leq 1} |q(x_1 - x_2)|^2 dx \quad o \quad \int_{|x-y|\leq 1} |q(x_1 - x_2)|^2\ |x-y|^{\rho-m} dx$$

el cambio de variables

$$\tilde{x}_1 = x_1 - x_2\ , \ \tilde{x}_2 = x_1 + x_2 \quad , \ \tilde{x}_i = x_i \quad para \quad 3\leq i \leq N$$

no altera las propiedades relevantes que vamos a estudiar, por tanto nos concretamos a probar que

$$q(x_1) = |x_1|^{-1}$$

pertenece a $M_{\rho<4}(R^{3N})$.

Proposición (1.1). La función

$$q(x) = |x_1|^{-1}$$

pertence a $M_\rho(R^{3N})$ para $\rho>3$ y $N\geq 1$.

Demostración.

a) Si $\rho>3N$ tenemos

$$M^2_{q,\rho}(x) = \int_{|y|\leq 1} dy_2 \dots dy_N \int dy_1 |q(x_1 - y_1)|^2 \leq C \int_{|y_1|\leq 1} dy_1\, |x_1 - y_1|^{-2}$$

donde C>0 es una constante, la última integral es impropia cúando $|x_2|\le 1$ ya que tiene una singularidad en $x_1=y_1$, sin perder generalidad hacemos $x_1=0$ lo que lleva la singularidad al origen

$$M^2_{q,\rho}(x) \le C \int_{|y_1|\le 1} |y_1|^{-2} dy_1 = 4\pi C \int_0^1 r^2 r^{-2}\, dr = 4\pi C < \infty$$

por tanto

$$M_{q,\rho}(x) \le \{4\pi C\}^{1/2} \quad \text{para } \rho \ge 3N \text{ y cada } x\in R^{3N}$$

b) si N>1 y $3<\rho<3N$ tenemos

$$M^2_{q,\rho}(x) = \int_{|x-y|\le 1} |q(y_1)|^2\, |x-y|^{\rho-3N} dy \quad ,$$

definimos $\tilde{x}=(x_2,\ldots,x_N)$ y $\tilde{y}$ de manera análoga, lo que da

$$|\tilde{x}-\tilde{y}| \le |x-y| \le 1 \quad \text{implica} \quad 1 \le |x-y|^{-1} \le |\tilde{x}-\tilde{y}|^{-1}$$

y como $3N-\rho>0$ queda

$$1 \le |x-y|^{\rho-3N} \le |\tilde{x}-\tilde{y}|^{\rho-3N} ,$$

$$M^2_{q,\rho}(x) \le \int_{|x-y|\le 1} |q(y_1)|^2\, |\tilde{x}-\tilde{y}|^{\rho-3N} dy \le C_2 \int_{|\tilde{x}-\tilde{y}|\le 1} d\tilde{y}\, |\tilde{x}-\tilde{y}|^{\rho-3N} \int_{|x_1-y_1|\le 1} dy_1 |q(y_1)|^2$$

$$\le \int_0^1 dr\; r^{3(N-1)-1}\, r^{\rho-3N} \int_{|y_1|\le 1} |x_1-y_1|^{-2} dy_1 \cdot C_2\, W_{3N-3}$$

donde W_{3N-3} es el área de la esfera unitaria en R^{3N-3} y C_2 es una constante positiva, la segunda integral la calculamos en (a) y con la primera queda

$$M^2_{q,\rho}(x) \le C_2 W_{3N-3} \left(\int_{|y_1|\le 1} dy_1\, |x_1-y_1|^{-2} \right) \int_0^1 dr\; r^{\rho-4} = \frac{C_3}{\rho-3} < \infty$$

por tanto

$$M^2_{q,\rho}(x) \le \left\{ \frac{C_3}{\rho-3} \right\}^{1/2} \quad \text{para } 3<\rho<3N \text{ y cada } x\in R^{3N}$$

c) en el caso N=1 $M_{q,\rho}(x)$ es acotada en todo R^3 para $\rho>2$, en particular para p>3 .

Un resultado más débil pero de aplicación sencilla sobre la acotación relativa del potencial coulombiano es el

Teorema (1.2). Si el potencial $Q(x\ ,\ldots,x\ )$ tiene la forma

$$Q = \sum_{i=1}^{N} q_{0i}(x_i) + \sum_{1\le i<j}^{N} q_{ji}(x_j - x_i)$$

donde cada $q_{ji}(x)$ ($i>1$, $j\ge 0$) es localmente integrable y acotada en infinito; es decir, existe una R>0 tal que

$$\int_{|x|<R} |q_{ji}(x)|^2 dx < \infty \quad \text{y} \quad |q_{ji}(x)| \le C \quad \text{para } |x|\ge R$$

Entonces para cada $\varepsilon>0$ existe una $C_\varepsilon>0$ tal que

$$\|Qf\| \le C_\varepsilon \|f\| + \varepsilon \|T_0 f\| \quad \text{para cada } f\in D(T_0).$$

El potencial $|x|^{-1}$, $x\in R^3$, satisface las hipótesis del teorema anterior ya que

$$\int_{|x|\le R} |x|^{-2} dx = 4\pi R < \infty \quad \text{y} \quad |x|^{-1} \le R^{-1} \quad \text{para cada } |x|\ge R>0.$$

Para terminar con la caracterización de la interacción coulombiana tenemos la

Proposición (1.3). El potencial

$$Q=\sum_{i=1}^{N}\frac{a_i}{|x_i|}+\sum_{i<j}^{N}\frac{b_{ij}}{|x_i-x_j|}$$

es $\overline{T}_0$-compacto.

La demostración es inmediata ya que $Q\in M_{3<p<4}(R^{3N})$ y

$$\lim_{|x|\to\infty} N_q(x)=\left\{\lim_{|x|\to\infty}\int_{|y|\le 1}|Q(x-y)|^2dy\right\}^{1/2}=0$$

luego el resultado se sigue de Teoremas (4.5) y (4.6), \$4.4-III.

Resumiendo. El operador minimal $\overline{T}_0+Q:L2(R^{3N})\circlearrowleft$

$$D(T_0+Q)=C_0^\infty(R^{3N})\quad,\ (T_0+Q)f=-\Delta f+Qf$$

tiene las propiedades siguientes

a) es esencialmente autoadjunto; es decir, su cerradura $\overline{T_0+Q}$ que denotamos por $\mathbb{H}$

(1.3) $\quad D(\mathbb{H})=W_2(R^{3N})\quad,\ \mathbb{H}f=-\Delta f+Qf$

es un operador autoadjunto sobre $L2(R^{3N})$, donde las derivadas son distribucionales

b) $\mathbb{H}$ es acotado por abajo por una constante α

c) la interacción coulombiana (1.2) es $\overline{T}_0$-compacta; es decir, para cada $\varepsilon>0$ existe una $C_\varepsilon>0$ tal que

$$\|Qf\|\le C_\varepsilon\|f\|+\varepsilon\|\overline{T}_0f\|\quad \text{para cada } f\in W_2(R^{3N})$$

$$Q:(W_2(R^{3N}),\langle .,.\rangle_2)\longrightarrow(L_2(R^{3N}),\langle .,.\rangle)\ \text{es compacto}$$

d) $\sigma_e(\mathbb{H})=\sigma(\overline{T}_0)=[\alpha,+\infty)$.

Nota. La acotación relativa de Q por $\overline{T}_0$ permite probar que en regiones acotadas $L2(\Omega)$ podemos calcular las funciones propias del operador de Schröedinger sujetas a la condición de frontera $u(\partial\Omega)=0$ con la precisión deseada.

Nota. La invariancia del espectro esencial da la prueba de que el espectro puntual de $\mathbb{H}$ (si tiene) se localiza en la parte inferior de $\sigma(\mathbb{H})$, abajo de α .

2. El operador de Schröedinger en $L2(\Omega)$

Asumimos que $\Omega\subset R^{3N}$ es una region abierta y acotada con frontera suave. En esta seccion daremos la definición exacta de lo que entendemos por operador de Schröedinger en $L2(\Omega)$.

El resultado fundamental es la acotación relativa de la interacción coulombiana: para cada $\varepsilon>0$ existe una $C_\varepsilon>0$ tal que

$$\|Qf\|\le C_\varepsilon\|f\|+\varepsilon\|\overline{T}_0f\|\quad \text{para } f\in W_2(R^{3N})$$

por tanto las respectivas formas sesquilineales de $\overline{T}_0$ y Q están relativamente acotadas

$$|\langle Qf,f\rangle|\le C_\varepsilon\|f\|^2+\varepsilon\langle\overline{T}_0f,f\rangle\quad \text{para } f\in W_2(R^{3N})$$

en particular se satisface

(2.1) $\quad |\langle Qf,f\rangle|\le C_\varepsilon\|f\|^2+\varepsilon\langle\nabla f,\nabla f\rangle\quad$ para cada $f\in C_0^\infty(\Omega)$.

El operador T_0 (1.1) induce la forma sesquilineal $t_\Omega(.,.)$

$$D(t_\Omega)=C_0^\infty(\Omega) \quad , \quad t_\Omega(u,v)=\langle\nabla u,\nabla v\rangle$$

cuya cerradura $\bar{t}_\Omega(.,.)$ en $L2(\Omega)$ está dada por

$$D(\bar{t}_\Omega)=W_1^0(\Omega)\ , \quad \bar{t}_\Omega(u,v)=\langle\nabla u,\nabla v\rangle ,$$

donde las derivadas distribucionales.

Ya que la forma $\langle Qu,u\rangle$ está acotada por $t_\Omega(.,.)$ con t_Ω-cota<1 según (2.1) entonces la forma $t_\Omega(u,u)+\langle Qu,u\rangle$ tiene la cerradura

(2.2) $D(h_\Omega)=W_1^0(\Omega) \quad , \quad h_\Omega(u,v)=\langle\nabla u,\nabla v\rangle+\langle Qu,v\rangle$

(las derivadas son distribucionales) y $h_\Omega(.,.)$ tiene las propiedades siguientes

i) es densamente definida sobre $L2(\Omega)$

ii) es simétrica y acotada por abajo

iii) es cerrada.

Con las propiedades anteriores, la forma $h_\Omega(.,.)$ induce el operador de Schröedinger $\mathbb{H}_\Omega$ autoadjunto sobre $L2(\Omega)$ (Corolario 5.7, III-$5.4) que describimos a continuación :

i) el operador $\mathbb{H}_\Omega$ está dado por

(2.3) $D(\mathbb{H}_\Omega) = W_1^0(\Omega)\cap W_2(\Omega) = \{ f\in W_2(\Omega) \mid f(\partial\Omega)=0 \}$

$$\mathbb{H}_\Omega f=-\Delta f+Qf$$

donde las derivadas son distribucionales

ii) $h_\Omega(u,v)=\langle\mathbb{H}_\Omega u,v\rangle$ para $u\in D(\mathbb{H}_\Omega)$ y $v\in W_1^0(\Omega)$

iii) si $u\in W_1^0(\Omega)$, $w\in L2(\Omega)$ y se satisface

$$h_\Omega(u,v)=\langle w,v\rangle \quad \text{para cada } v\in W_1^0(\Omega)$$

entonces $u\in D(\mathbb{H}_\Omega)$ y $w=\mathbb{H}_\Omega u$.

La definición precisa (a) de $\mathbb{H}_\Omega$ se obtiene de la teoria de ecuaciones diferenciales con valores en la frontera basada en el concepto de solución débil, los incisos (b) y (c) son resultados contenidos en el teorema de extensión de Friedrichs.

El problema de autovalores de $\mathbb{H}_\Omega$ es

$$(-\Delta+Q)u=\lambda u \quad , \quad u(\partial\Omega)=0$$

donde las derivadas son distribucionales, la existencia y diferenciabilidad clásica de las funciones propias se muestra en la sección siguiente.

3. Compacidad de la resolvente $(\mathbb{H}_\Omega-z)^{-1}$ en los espacios $(L2(\Omega),\langle.,.\rangle)$ y $(W_1^0(\Omega),\langle.,.\rangle_1)$

Por densidad de $C_0^\infty(\Omega)$ en $(W_1^0(\Omega),\langle.,.\rangle_1)$ es inmediato que la acotación relativa de $\langle Qu,u\rangle$ por $\langle\nabla u,\nabla u\rangle$ (2.1) se satisface para cada $u(x)\in W_1^0(\Omega)$; es decir, para cada $\varepsilon>0$ existe una $C_\varepsilon>0$ tal que se cumple

(3.1) $|\langle Qu,u\rangle| \le C_\varepsilon \|u\|^2 + \varepsilon\langle \nabla u, \nabla u\rangle$ para $u \in W_1^0(\Omega)$.

Con la relación (3.1) es fácil probar que la forma $h_\Omega(.,.)$ tiene las propiedades siguientes (Teoremas (5.5)-III y (2.1)-IV)

a) es acotada en $(W_1^0(\Omega),\langle .,.\rangle_1)$; es decir, existe una constante K>0 tal que

$$|h_\Omega(u,v)| \le K \|u\|_1 \|v\|_1 \quad \text{para} \quad u,v \in W_1^0(\Omega)$$

b) es elíptica; es decir, existen constantes $\alpha>0$ y $\beta \in R$ tales que

$$h_\Omega(u,u) - \beta\langle u,u\rangle \ge \alpha \|u\|_1^2 \quad \text{para} \quad u \in W_1^0(\Omega)$$

por tanto (de la teoría de ecuaciones diferenciales basada en el concepto de solución débil) existen dos operadores COMPACTOS y AUTOADJUNTOS (Teoremas (3.2) y (4.1), IV)

1) $R_1(\beta):(L2(\Omega),\langle .,.\rangle)\circlearrowleft$ y $D(R_1(\beta))=L2(\Omega)$

2) $R_2(\beta):(W_1^0(\Omega),\langle .,.\rangle_1)\circlearrowleft$ y $D(R_2(\beta))=W_1^0(\Omega)$

que satisfacen

$$h_\Omega[R_1(\beta)f,v] - \beta\langle R_1(\beta)f,v\rangle = \langle f,v\rangle$$
$$h_\Omega[R_2(\beta)f,v] - \beta\langle R_2(\beta)f,v\rangle = \langle f,v\rangle$$

para cada $f \in L2(\Omega)$ y cada $v \in W_1^0(\Omega)$.

El teorema de regularidad de las soluciones debiles al problema de Dirichlet da los resultados siguientes

a) $R_1(\beta)=(\mathbb{H}_\Omega-\beta)^{-1}$, y por tanto $R_1(\beta)$ y $\mathbb{H}_\Omega$ tienen las mismas funciones propias

b) $R_2(\beta)$ y $\mathbb{H}_\Omega$ tienen las mismas funciones propias

c) los autovalores de $R_1(\beta)$ y $R_2(\beta)$ son los recíprocos de $\mathbb{H}_\Omega-\beta$, cada autovalor es de multiplicidad finita

d) las funciones propias de $\mathbb{H}_\Omega$ pertenecen a $C^\infty(\overline{\Omega})$ y satisfacen la condicnión de frontera $u(\partial\Omega)=0$.

La compacidad de $R_1(\beta)$ y $R_2(\beta)$ permite probar que el método de proyecciones converge a lo autovalores y autovectores de $\mathbb{H}_\Omega$ (Teoremas (5.2) y (5.3),IV) :

a) Si $\{\hat{\varphi}_i\}$ es una base ortonormal en $(L2(\Omega),\langle .,.\rangle)$ del dominio $D(H_\Omega)$:

$$\hat{\varphi}_i(\partial\Omega)=0 \quad y \quad \langle\hat{\varphi}_i|\hat{\varphi}_j\rangle = \int_\Omega \hat{\varphi}_i^* \hat{\varphi}_j \, dx = \delta_{ij}$$

entonces los autovalores y autovectores de la ecuación

$$\sum_{j=1}^N \{\langle\hat{\varphi}_i|\mathbb{H}_\Omega|\hat{\varphi}_j\rangle - \lambda^{(N)}\delta_{ij}\} u_j^{(N)} = 0 \quad , \; 1 \le i \le N$$

convergen a los de $\mathbb{H}_\Omega$ y sólo a ellos en la norma $\|.\|=\sqrt{\langle .,.\rangle}$ cuando N--> ∞ .

b) Si $\{\hat{\varphi}_i\}$ es una base ortonormal en $(W_1^0(\Omega),\langle .,.\rangle_1)$ de $D(H_\Omega)$:

$$\hat{\varphi}_i(\partial\Omega)=0 \quad y \quad \langle\hat{\varphi}_i|\hat{\varphi}_j\rangle_1 = \int_\Omega \{\hat{\varphi}_i^*\hat{\varphi}_j + \nabla\hat{\varphi}_i^* \cdot \nabla\hat{\varphi}_j\} dx = \delta_{ij}$$

entonces los autovectores y autovalores de la ecuación

$$\sum_{j=1}^{N}\left\{\langle\hat{\varphi}_i|\mathbb{H}_\Omega|\hat{\varphi}_j\rangle_1-\lambda^{(N)}\delta_{ij}\right\}u_j^{(N)}=0 \quad , \; 1\leq i\leq N$$

convergen a los de $\mathbb{H}_\Omega$ y sólo a ellos en la norma $\|.\|_1=\{\langle .,.\rangle_1\}^{1/2}$ cuando $N\to\infty$.

Con lo anterior el problema de autovalores en $L2(\Omega)$

$$(-\Delta+Q)u=\lambda u \quad , \quad u(\partial\Omega)=0$$

está resuelto desde el punto de vista numérico, queda por mostrar que las funciones propias de $\mathbb{H}_\Omega$ convergen a las de $\mathbb{H}$ (1.3) cuando Ω se expande por todo R^{3N}.

4. Convergencia generalizada fuerte y estabilidad del espectro puntual del operador de Schröedinger.

Al expander la region acotada Ω generamos una sucesion Ω_n ; en cada Ω_n hemos definido el operador de Schroedinger $\mathbb{H}_{\Omega_n}$ cuyo espectro y funciones propias podemos calcular con la precisión deseada, para probar estos que convergen a los del operador $\mathbb{H}$ (1.3) construiremos la sucesión de operadores autoadjuntos $\{\mathbb{H}_n\}$ en $L2(R^{3N})$.

A cada elemento $f\in L2(\Omega_n)$ lo identificamos con el elemento $f\in L2(R^{3N})$

$$\hat{f}=\begin{cases} f & \text{para } x\in\overline{\Omega}_n \\ 0 & \text{en caso contrario}\end{cases}$$

por lo cual $L2(\Omega_n)$ es un subespacio cerrado de $L2(R^{3N})$ y el teorema de proyección da: $L_2(R^{3N})=L_2(\Omega_n)\oplus L_2(\Omega_n)^\perp$.

Sobre $L2(\Omega_n)^\perp$ definimos el operador cero

$$D(\hat{O})=L_2(\Omega_n)^\perp \quad , \quad \hat{O}f=0$$

por tanto la suma directa de $(\mathbb{H}_{\Omega_n},L2(\Omega_n))$ y $(O,L2(\Omega_n)^\perp)$ dada por

$$\mathbb{H}_n:L_2(R^{3N})\circlearrowleft \; , \; D(\mathbb{H}_n)=\{f\in L_2(R^{3N})|P_nf\in D(\mathbb{H}_{\Omega_n}) \text{ y } P_n^\perp f\in D(\hat{O})\}$$

$$\mathbb{H}_nf=\mathbb{H}_{\Omega_n}P_nf+O\,P_n^\perp f=\mathbb{H}_{\Omega_n}P_nf$$

,donde P_n y $P_n^\perp$ son las proyecciones sobre $L2(\Omega_n)$ y $L2(\Omega_n)^\perp$, es un operador autoadjunto sobre $L2(R^{3N})$ (Def. (1.1) y Teo. (1.1),V) . Por construcción, tenemos

a) $\sigma(\mathbb{H}_n)=\sigma(\mathbb{H}_{\Omega_n})\cup\{0\}$

b) cada autovector de $\mathbb{H}_{\Omega_n}$ es autovector de $\mathbb{H}_n$ con el mismo autovalor.

La sucesión $\{\mathbb{H}_n\}$ converge en el sentido generalizado fuerte al operador $\mathbb{H}$: para cada $u\in C_0^\infty(R^{3N})$ existe una n_0 apartir de la cual

$$\text{soporte}\{u(x)\}\subset C_0^\infty(\Omega_n) \quad \text{para } n\geq n_0$$

por tanto

$$\lim_n \|\mathbb{H}_nu-\mathbb{H}u\|=0$$

y como $C_0^\infty(R^{3N})$ es denso en la gráfica de $\mathbb{H}$ entonces las resolventes convergen fuertemente

$$\lim_{n} \| R(z,\mathbb{H}_n) f - R(z,\mathbb{H}) f \| = 0$$

para cada $f \in L2(R^{3N})$ y cada $z \in \Delta_b \cap \rho(\mathbb{H})$.

Como la interacción coulombianan es $\bar{T}_0$-compacta el Teo. (4.4)-III afirma que

$$\sigma_e(\mathbb{H}) = \sigma_e(\bar{T}_0) = [0, +\infty)$$

por tanto $\mathbb{H}$ sólo puede tener autovalores localizados en el intervalo $(\alpha, 0)$, α es una cota inferior de $\mathbb{H}$.

Teorema (4.1). Para el potencial

$$Q = \sum_{k=1}^{N} \frac{e_0 e_k}{|x_k|} + \sum_{k=1}^{N} \sum_{j=1}^{k-1} \frac{e_k e_j}{|x_k - x_j|}$$

si todos los e_k tiene el mismo signo, e_0 tiene el opuesto y $|e_0| \geq |\sum_k e_k|$ entonces el operador $\mathbb{H} = -\Delta + Q$ tiene espectro discreto.

El teorema anterior se aplica a cualquier sistema neutro y a iones como el ion molecular de Hidrógeno .

Teorema (4.2). Si $Q(x)_- = \max\{0, -Q(x)\}$ pertenece a $M_\rho(R^{3N})$ para alguna $\rho < 4$ entonces el autovalor más pequeño de $\mathbb{H}$ es SIMPLE.

En nuestro caso, $Q(x)_- = 0$ siempre pertenece a $M_{\rho<4}(R^{3N})$ según afirma la proposición (1.1) por tanto la energía del estado base de $\mathbb{H}$ es un autovalor SIMPLE.

El $\min \sigma(\mathbb{H}_n) = \lambda_0^{(n)}$ es un autovalor simple SIMPLE para cada n, por tanto el Teorema (3.2)-V da un criterio que garantiza la convergencia de la sucesión de funciones de estado base de los $\mathbb{H}_n$ a la función de estado badse de $\mathbb{H}$: basta con que la sucesión de autovalores $\{\lambda_0^{(n)}\}$ sea la ÚNICA que converge a la energía de estado base de $\mathbb{H}$; en la sección siguiente damos algunos ejemplos que muestran la validez de esta condición de estabilidad.

Nota. La forma de la región Ω puede seleccionarse de la forma más conveniente para aprovechar las simetrías físicas o matemáticas del problema en estudio, siempre y cuando tenga frontera suave.

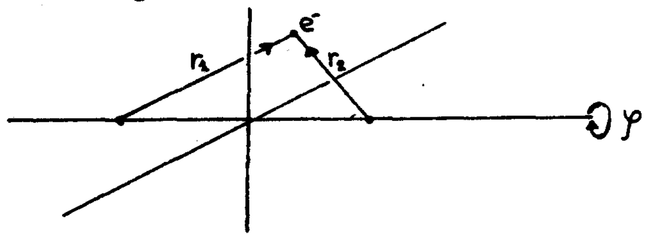
5. Ejemplos

Ley-Koo y S.A. Cruz dan la solución exacta a la ecuación de Schröedinger para tres sistemas, con uno y dos núcleos y con un solo electrón, en regiones acotadas elipsoidales (J. Chem. Phy., Vol 79, No. 8, 1981). La idea es usar la aproximación de Born-Oppenheimer (nucleos fijos) colocando los nucleos en los focos del elipsoide de manera que las coordenadas del electrón son

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}$$

$$\eta = \frac{r_1 - r_2}{R}$$

$$\varphi = \varphi$$



Como la superficie $\xi = \xi_0$ corresponde a un elipsoide de revolución, la condición de frontera toma la forma

$$\Psi(\xi = \xi_0, \eta, \varphi) = 0 .$$

Los parámetros que definen el tamaño y forma del elipsoide son :

i) $1/\xi_0$ =excentricidad
ii) R = distancia focal
iii) $\xi_0 R$= eje mayor .

En las figuras 1,2 y 3 se mustran el comportamiento de los niveles de energía para R fijo y distintas .

En el trabajo citado se concluye:

Para los tres sistemas hay una tendencia en el comportamiento de los niveles de energía :

a) al reducir la región la energía aumenta

b) al aumentar la región los niveles de energía se acercan ASINTÓTICAMENTE a los valores del sistema libre (que corresponden a los del operador $\mathbb{H}$ en $L2(\mathbb{R}^{3N})$) ,

ambas afirmaciones coinciden con las predicciones hechas sobre el comportamiento de $\sigma(\mathbb{H}_n)$ cuando $n \to \infty$ ($1.3, incisos (4) ,(5) y Teo. (2.2), Cap. V), pero lo más importante es que se muestra la estabilidad de la energía del estado base de $\mathbb{H}$

los autovalores mínimos de la sucesión $\{\mathbb{H}_n\}$ forma la ÚNICA sucesión que converge al estado base de $\mathbb{H}$,

no se menciona la multiplicidad de los estados excitados, pero de la convergencia de los espectros es de esperarse que tambien sean estables ($\mathrm{Dim}\,\mathbb{P}_n \leq \mathrm{Dim}\,\mathbb{P}$).

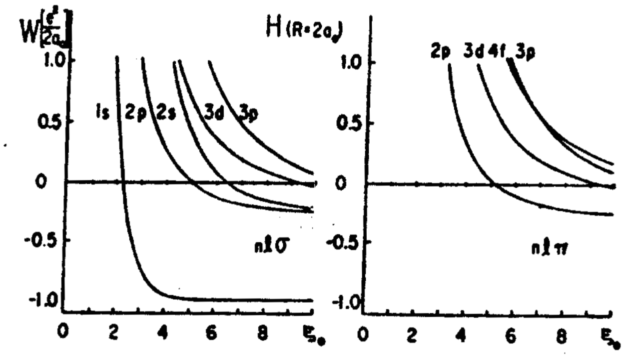


FIG. 1. Energy of the lowest $nl\sigma$ qnd $nl\pi$ states of the hydrogen atom inside prolate spheroidal boxes of different sizes and eccentricities $R = 2a_0$.

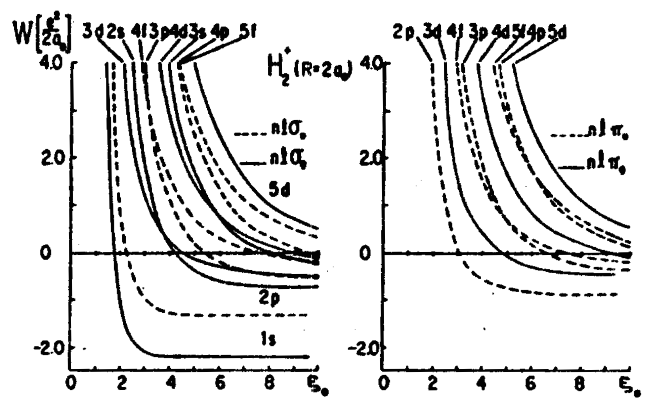


FIG. 2. Energy of the lowest $nl\sigma$ and $nl\pi$ states of the H_2^+ molecular ion inside prolate spheroidal boxes of different sizes and eccentricities $R = 2a_0$.

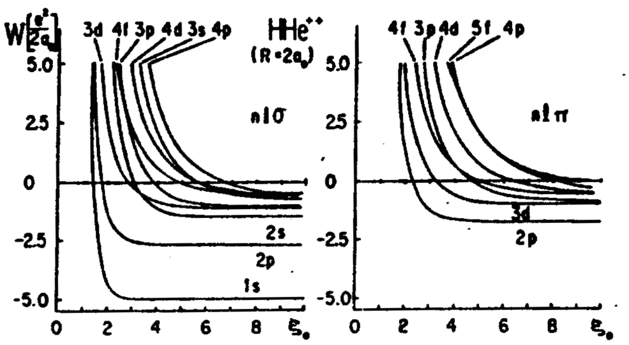


FIG. 3. Energy of the lowest $nl\sigma$ and $nl\pi$ states of the HeH^{++} molecular ion inside prolate spheroidal boxes of different sizes and eccentricities $R = 2a_0$.

Otro trabajo que apoya la conjetura de que el espectro puntual de $\mathbb{H}$ es estable es el de Marin, Cruz (J. Phys. B, 24, 1991).

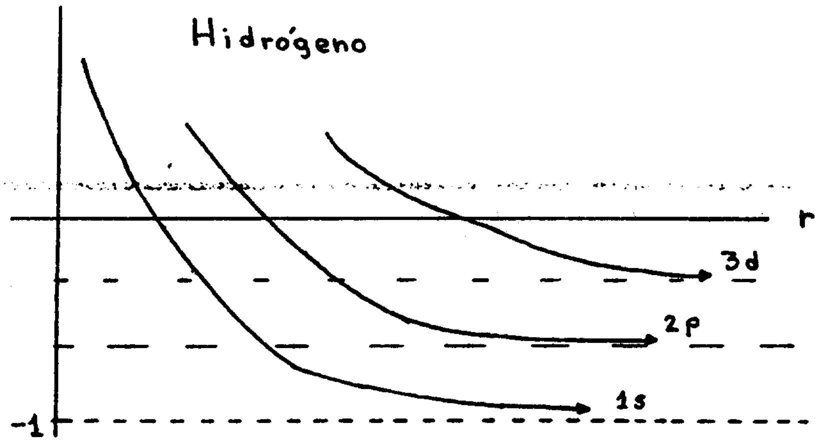
El método es numérico, se aplica a los átomos de Hidrógeno y Helio con nucleos fijos de manera que para aprovechar la simetría del problema proponen una función base de la forma

$$\Psi = (r-r_0)\,\Phi(r,\theta,\varphi,\alpha)$$

donde r_0=radio de la esfera que encierra al sistema, y para cada r_0 fijo el parámetro α se ajusta variacionalmente

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\int_{B_{r_0}} \Psi^*(-\Delta+Q)\Psi\,dx = 0 .$$

Por tratarse de una sola función base, este método es un caso particular del propuesto en la Tesis, ya que cada función $\Psi_{r_0,\alpha}$ forma parte de una base en $L2(B_{r_0})$. Las tablas 1,2 y 3 dan la convergencia del espectro $\sigma(\mathbb{H}_r)$ al aumentar el radio y el comportamiento que se observa es congruente con la conjetura de que el espectro puntual de $\mathbb{H}$ es estable:



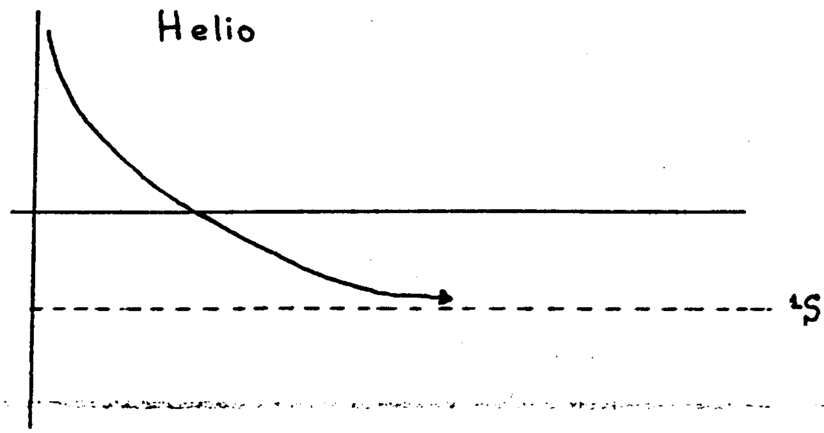


Table 1. Hydrogen atom within spherical box with impenetrable walls. Ground state energy as a function of radius of the box[a].

r_0	α	E_{var}^{b}	E_{SCF}^{c}	E_{exact}^{d}
0.53622	0.4137	25.2474		25.0000
0.8100	0.4275	8.8550	8.784	
1.1500	0.4462	2.9906	2.972	
1.22195	0.4505	2.3803		2.3669
1.7110	0.4806	0.2534	0.252	
2.0000	0.4999	−0.2500	−0.250	−0.2500
2.2005	0.5141	−0.4642	−0.464	
2.44558	0.5322	−0.6390		−0.6400
3.04187	0.5786	−0.8544		−0.8573
3.5287	0.6178	−0.9277	−0.932	
4.08671	0.6616	−0.9663		−0.9707
4.4153	0.6859	−0.9781	−0.982	
5.0200	0.7262	−0.9896	−0.992	
5.80119	0.7691	−0.9956		−0.9980
6.2253	0.7883	−0.9971	−0.998	

[a] Energies in Ryd. Distances in a_0.
[b] This work.
[c] SCF calculations by Ludeña (1977).
[d] Exact calculation by Ley-Koo and Rubinstein (1979).

Table 2. Hydrogen atom within spherical box with impenetrable walls. Energy values for the excited states 2p and 3d as a function of radius of the box[a].

State	r_0	α	E_{var}^{b}	E_{exact}^{c}
2p	2.0	0.5121	3.1791	3.1520
	2.5	0.4503	1.7173	1.7039
	3.0	0.4107	0.9694	0.9625
	3.5	0.3840	0.5459	0.5424
	4.0	0.3654	0.2888	0.2870
	5.0	0.3433	0.0155	0.0152
	6.0	0.3333	−0.1111	−0.1111
	8.0	0.3338	−0.2085	−0.2089
	10.0	0.3492	−0.2369	−0.2377
	14.0	0.3918	−0.2484	−0.2491
3d	7.0	0.3106	0.1946	0.1932
	7.5	0.2995	0.1376	0.1366
	8.0	0.2900	0.0928	0.0921
	9.0	0.2750	0.0283	0.0280
	10.0	0.2639	−0.0141	−0.0142
	12.0	0.2499	−0.0625	−0.0625
	14.0	0.2436	−0.0862	−0.0862
	18.0	0.2450	−0.1044	−0.1047
	20.0	0.2501	−0.1076	−0.1079

[a] Energies in Ryd. Distances in a_0.
[b] This work.
[c] Exact values calculated through the method of Ley-Koo and Rubinstein (1979).

Table 3. Helium atom inside a spherical box with impenetrable walls. Ground state (^1S) energy as a function of radius of the box[a].

r_0	α	E_{var}^{b}	E_{SCF}^{c}
0.5	0.7465	22.9229	22.79095
1.0	0.8320	1.0626	1.06122
1.5	0.9330	−1.8456	−1.86422
2.0	1.0435	−2.5285	−2.56253
2.5	1.1510	−2.7273	−2.76644
3.0	1.2428	−2.7935	−2.83083
4.0	1.3701	−2.8302	−2.85852
5.0	1.4453	−2.8392	−2.86134
6.0	1.4924	−2.8426	−2.86151

[a] Energies in Hartrees. Distances in a_0.
[b] This work.
[c] SCF values calculated by Ludeña (1978).

REFERENCIAS Y NOTAS

Capítulo 1.

Las secciones \$\$1,2,3 pueden consultarse en [6],[7],[13] y [17]; Rektorys [13] da una introducción sencilla y elemental de los espacios de Sobolev enfocada a la solución de ecuaciones diferenciales parciales con condicniones de frontera. Kato [6] da una exposición detallada de \$4.

Capítulo 2.

Las secciones \$1.1,2 y 6 pueden consultarse en [6],[7] y [18]; para \$1.3,4 y 5 ver Kato [6]; \$2 es básicamente de Weidmann [17]; para \$\$4,5,6 ver [6],[7] y [17]; para \$7 ver [6] y [17]; Rektorys [13] da una prueba sencilla del Teorema de Lax-Milgram.

Capítulo 3.

Las secciones \$1, \$2.1 y \$2.3 pueden consultarse en [6] y [18], en [18] se dan los detalles de \$2.2; \$3 está contenido básicamente en [6]; los teoremas de perturbación de operadores autoadjuntos (\$4.1,2 y 3) pueden consultarse en [6] y [17]. Los teoremas (4.5), (4.6) y (4.7) se demuestran en Weidmann [17] cap. 10.

La conección entre operadores y formas sesquilineles (\$5.1,2,3 y 4) se estudia con detalle en Kato [6] y usamos las estimaciones de Weidmann [17] sobre las familias $M_\rho(R^n)$ para aplicar los resultados de Kato.

Capítulo 4.

Rektorys [13] da una exposición general y muy sencilla (sin dar todas las demostraciones) de la teoría de ecuaciones basada en el concepto de solución débil (secciones \$\$2,3 y 4) sin abordar en detalle el problema de regularidad; Folland [3] resulve el problema de regularidad para potenciales infinitamente diferenciables ,Gilbarg [5], Schechter [14] y Treves [16] dan una exposición completa de la teoría de ecuaciones diferenciales parciales con condiciones de frontera dando un planteamiento y solución general del problema de regularidad.

Para la sección \$5 puede consultarse Krasnosel'skii [8] y Mikhlin [10], este último expone varios metodos (casos prticulares del método de proyecciones) para resolver

$$Tu = \lambda u \qquad , T \text{ es eliptico}$$

con distintas condiciones de frontera (en regiones acotadas) sin dar demostraciones de los teoremas importantes.

Capítulo 5.

La suma directa de operadores es un concepto elemental que puede consultarse en [6] y [17]; la construcción de los operadores $\mathbb{H}_\Omega = \mathbb{H}^1_\Omega + \hat{0}$ es la primera contribución "original" al trabajo que permite eludir el problema técnico:no poder comparar a $\mathbb{H}^1_\Omega$ con $\mathbb{H}$, esta construcción permite aplicar toda la teoría de sucesiones de operadores autoadjuntos desarrollada por Kato en el capítulo VIII de [6].

El concepto de conjunto de acotación, el Teo. (1.3) y la concepto de convergencia generalizada pueden consultarse en Kato [6] pags. 426-431.

El estudio de las propiedades de la sucesión $\{\mathbb{H}_n\}$ es otra contribución "personal" (seccion $1.3), en el inciso (4) se aplica la teoría de perturbaciones analíticas al problema de la perturbación de la frontera que desarrolla Kato en [6] ,páginas 423-426.

El Teo. (1.6) se tomo de Gelfand-Fomin [4] y la proposición (1.6) es una contribución personal.

El Teo. (2.1) sobre la convergencia de espectros es de Kato [6] (pag. 431) y del estudio de las propiedades de $\sigma(\mathbb{H}_n)$ se concluye el Teo. (2.2) que es otra contribución personal.

El concepto de autovalores estables y el Gran Teorema de Convergencia son de Kato [6] pags.437-439 y la aplicación al problema de autovalores del operador de Schröedinger en $L2(R^m)$ incluido el Teo. (3.2) es otra contribución personal.

Capítulo 6.

La mayor parte de esta capítulo es una aplicación de la teoría desarrollada en III,IV y V , excepto por : Teo. (2.1), [17] pag. 254; Lema 1, [1]; Teo. (2.2), [17] pag. 257; Teo. (3.2) ,[11] pag. 72; para teoremas (5.1),(5.2) y (6.1) ver Weidmann [17] pags, 247-254.

Capítulo 7.

Nuevamente este capítulo es aplicación de la teoría de III,IV y V, excepto por : Prop. (1.1) personal; el Teo. (1.2) esta demostrado en [12]; el Teo. (4.1) es de Schechter [15] pag. 280; el Teo. (4.2) esta en [17] pag. 326; las figuras 1,2 y 3 son del trabajo citado de Ley-Koo y las tablas 1,2 y 3 del trabajo de Marin y Cruz.

BIBLIOGRAFIA

[1] Coddintong-Levinson (1955),Theory of ordinary differential Equations .

[2] Davidov,A.S. (1963),Quantum Mechanics,Pergamon Press.

[3] Folland,G. (1976),Introduction to Partial Differential equations, Princenton University Press.

[4] Gelfand-Fomin (1963),Calculus of Variations, Prentice-Hall.

[5] Gilbarg-Trudinger (1981),Eliptic Partial Differential Equations of Second Oerder, Springer-Verlag.

[6] KATO,T. (1966),PERTURBATION THEORY for LINEAR OPERATORS, Springer-Verlag.

[7] Kolmogorov-Fomin (1975),Elementos de la teoria de funciones y del analisis funcional., Mir.

[8] Krasnosel'skii,M. A. (1972),Aproximate Solution of Operators Equations, Wolters-Noordhof.

[9] Massiah, A. (1964), Quantum Mechanics,North-Holland.

[10] Mikhlin,S. G. (1967),Approximate Methods for Solution of Differential and Integral Equatios, Elsevier.

[11] Muller-Pfeiffer (1981),Spectral Theory of Ordinary Differential Operators, Elis Horwood Series.

[12] Prugovecki, E. (1971), Quantum Mechanics in Hilbert Spaces , Academic Press.

[13] Rektorys,K. (1980),Variational Methods in Mathematics, Science and Engineering, Dordrecht.

[14] Schechter,M. (1977), Modern Methods in Partial Differential Equations, McGraw-Hill.

[15] Schechter, M. (1986), Spectra of Partial Differential Operators, North-Holland.

[16] Treves, F. (1975), Basic Linear Partial Differential Equations, Academis Press.

[17] WEIDMANN, J. (1976), LINEAR OPERATORS IN HILBERT SPACES, Springer-Verlag.

[18] Elsgoltz, L. (1983), Ecuaciones Diferenciales y Calculo de Variaciones, Mir.

[19] R.O. Esquivel, A.V. Bunge and M. A. Nuñez, Phys. Rev A 43, 3373 (1991).

[20] F. W. King, Phys. Rev. A 40, 1735 (1989).

CONCLUSIONES

Llama la atención el divorcio entre el analisis desarrollado por los matemáticos y el desarrollo por parte de físicos y químicos de métodos para resolver la ecuación de Schrödinger

Durante años se ha tratado de resolver la ecuación de Schoröedinger por el método de Ritz sin probar formalmente su convergencia, este trabajo muestra que no hay fundamento teórico que garantice tal convergencia a las funciones propias en los problemas de mayor interés (átomos y moléculas), lo que tiene una enorme importancia practica ya que en la actualidad se esta invirtiendo enormes sumas de dinero en cómputo para calcular propiedades atómicas y moleculares con un método que (a la luz de los resultados numéricos) NO CONVERGE.

EL método propuesto tiene varias ventajas sobre los actuales :

1) Resuelve el problema, hasta el momento abierto, de la convergencia a las funciones propias de operadores que carecen de resolvente compacta, lo que a su vez garantiza el cálculo preciso de las propiedades del sistema en estudio

2) El marco teórico en que se desarrolla el método permite plantear generalizaciones en distintas direcciones, como el calculo de funciones propias de operadores de mayor orden o el imponer condiciones de frontera distintas a las del problema de Dirichlet

3) Puede recuperarse un enorme trabajo computacional basado en el metodo de Ritz introduciendo apropiadamente las condiciones de frontera en las funciones base

4) La compacidad de la resolvente en regiones acotadas puede aprovecharse para desarrollar metodos más eficientes que el de Ritz sin perder la convergencia a las funciones propias .

Una objeción al método es el tiempo necesario para resolver el problema en una serie de regiones, pero si tomamos en cuenta el tiempo de los metodos actuales para calcular algo que no tiene que ser la solución buscada, resulta un poco irrelevante el factor tiempo. Por otro lado, la solución del problema de Dirichlet en una serie de regiones $\{\Omega_n\}$ ofrece la ventaja de verificar la convergencia y precisión del cálculo; por ejemplo para los momentos de la densidad de carga la sucesión

$$\{\langle \Psi_n | r^k | \Psi_n \rangle\}_{n=1}^{\infty}$$

es de cauchy (donde Ψ_n es la solución aproximada al problema de Dirichlet en Ω_n) por tanto la diferencia

$$|\langle \Psi_n | r^k | \Psi_n \rangle - \langle \Psi_{n+1} | r^k | \Psi_{n+1} \rangle|$$

da una cota del error respecto al valor exacto, algo que no ofrecen los métodos actuales.

Espero que con este trabajo se valore un poco el trabajo de los matematicos en el campo del analisis funcional, dejando de lado la idea de que es conocimiento que solo sirve para justificar lo que fisicos y quimicos ya conocen. Por otro lado, se motive la actualizacion de las matematicas en los posgrados de fisica y quimica para que el alumno conozca y desarrolle alternativas distintas a las que ofrecen los actuales cursos de fisica y quimica en los cuales las matematicas que se imparten son basicamente talacheras. Es necesario que se rompa el hielo entre matematicos y las ciencias aplicadas ya que la complejidad matematica de los problemas actuales impone una colaboracion interdisciplinaria.