

El espectro del laplaciano unidimensional en diferencias finitas

Rafael René del Río Castillo*

y

Herminio Blancarte Suárez**

* IIMAS, UNAM,
Circuito Escolar s/n, Ciudad Universitaria,
04510 Coyoacán, México, D. F.

delrio@servidor.unam.mx

** Licenciatura en Matemáticas Aplicadas,
Facultad de Ingeniería, UAQ,
Centro Universitario, Cerro de las Campanas s/n,
76010 Santiago de Querétaro, Qro.

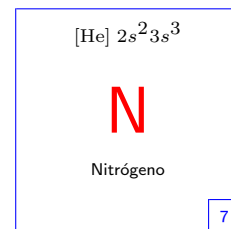
herbs@sunserver.dsi.uaq.mx

RECIBIDO: junio de 2002

ACEPTADO: septiembre de 2002

RESUMEN

El laplaciano en diferencias finitas, describe la energía cinética de un electrón moviéndose en una red o latice. Tiene como espectro puro y absolutamente continuo a $[-4v, 0]$, donde v es la dimensión de la latice Z^v [Carmona y Lacroix, 1990; Combes, 1997; Cycon *et al*]. Exhibimos un *cálculo elemental*, para caso unidimensional ($v = 1$) utilizando la serie y trasformada de Fourier.



peso atómico: 14.00674
punto de fusión: -210°C
punto de ebullición: -195.8°C

PRELIMINARES

El Laplaciano continuo $-\Delta$, es un operador autoadjunto en $\mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n)$ y su espectro esencial $\sigma(-\Delta) := \sigma_{ese}(-\Delta) = [0, \infty)$ [Hislop y Sigal, 1996].

RESULTADOS ELEMENTALES

Lema 1. La sucesión $\{\cos m\}_{m \in \mathbb{N}}$ forma un *subconjunto denso* en el intervalo $[-1, 1]$ [Ruiz, 1997].

La siguiente proposición fue extraída de Reed [1972], página 229.

Proposición. Si $F: M \rightarrow \mathbb{R}$ es una función medible acotada definida sobre un espacio medible (M, μ) . Y si T_F es un operador autoadjunto definido sobre $L^2(M, d\mu)$ dado por

$$(T_F g)(m) = F(m)g(m),$$

entonces

$$\sigma(T_F) = \mathbf{ranesen}(F),$$

donde $\lambda \in \mathbf{ranesen}(F)$ (el rango esencial de F) si y sólo si $\forall \varepsilon > 0$

$$\mu(\{m: |F(m) - \lambda| < \varepsilon\}) > 0,$$

o bien como

$$\mu(F^{-1}((\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon))) > 0,$$

donde

$$\{m: |F(m) - \lambda| < \varepsilon\} = F^{-1}((\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)),$$

y

$$F^{-1}(B) := \{m \in M: F(m) \in B\},$$

para $B \subset \mathbb{R}$.

Como un ejemplo elemental de la proposición anterior, consideremos $F: \mathbb{R} \rightarrow [-1, 1]$ definida por $F(m) := \cos m$, donde \mathbb{R} es un espacio medible con la medida de Lebesgue λ entonces,

$$\mathbf{ranesen}(\cos) = [-1, 1].$$

Ya que si $\lambda \in [-1, 1]$ para $\varepsilon > 0$, por el lema 1, $\cos^{-1}(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) \neq \emptyset$, y $\cos^{-1}(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ es un abierto en \mathbb{R} , por la continuidad

[He] $2s^2 3s^4$



Oxígeno

8

peso atómico: 15.9994
punto de fusión: -218.8°C
punto de ebullición: -183°C

del cos. Así para cada $m \in \cos^{-1}(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ existe $\delta > 0$ tal que $(m - \delta/2, m + \delta/2) \subset \cos^{-1}(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) \Rightarrow 0 < \delta = \lambda((m - \delta/2, m + \delta/2)) \leq \lambda(\cos^{-1}(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon))$.

Inversamente, si $\lambda \in \mathbf{ranesen}(\cos) \Rightarrow \cos^{-1}(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) \neq \emptyset \quad \forall \varepsilon > 0$, *i.e.*, dada $\varepsilon > 0$ existe $m \in \mathbb{R}$ tal que $-\varepsilon - \cos m < \lambda < \varepsilon - \cos m \Rightarrow -1 - \varepsilon < -\varepsilon - \cos m < \lambda < \varepsilon - \cos m < \varepsilon + 1 \Rightarrow |\lambda| < 1 + \varepsilon \quad \forall \varepsilon > 0 \Rightarrow |\lambda| \leq 1$. ■

Si ahora definimos $F: \mathbb{R} \Rightarrow \mathbb{R}$, por $F(m) := 2(\cos m - 1)$, en principio la imagen de dicha función, forma un subconjunto denso en $[-4, 0]$ por la invarianza de la densidad ante traslaciones y homotecias, y podemos concluir que

$$\mathbf{ranesen}(2(\cos m - 1)) = [-4, 0]$$

Definición. Para un operador autoadjunto A , un *invariante unitario* de A es una propiedad P tal que

$$P(A) = P(UAU^{-1}) \quad \forall U \text{ operador unitario,}$$

i.e., los invariantes unitarios son propiedades intrínsecas de los operadores autoadjuntos y son independientes de la representación de éstos [Reed y Simon, 1972].

Ejemplo. El espectro $\sigma(A)$ de A , es un ejemplo de un invariante unitario, *i.e.*,

$$\sigma(A) = \sigma(UAU^{-1}) \quad \forall U \text{ operador unitario}$$

[Reed y Simon, 1972].

EL ESPECTRO DEL LAPLACIANO UNIDIMENSIONAL EN EL CASO DISCRETO

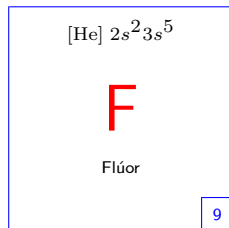
Consideremos $l^2(\mathbb{Z}) := \{u: u = \{u(n)\}_{n \in \mathbb{Z}}\}$ y

$$\|u\| \equiv \sqrt{\sum_{n \in \mathbb{Z}} |u(n)|^2} < \infty.$$

Denotemos el laplaciano discreto $-\Delta_d$, definido sobre $l^2(\mathbb{Z})$ como

$$(-\Delta_d u)(n) = u(n + 1) + u(n - 1) - 4u(n).$$

Consideremos $u \in l^2(\mathbb{Z})$, cada $u(n)$ es el coeficiente de Fourier de la serie



peso atómico: 18.9984032
 punto de fusión: -219.7 °C
 punto de ebullición: -188.2 °C

de Fourier de una función $f \in L^2[-\pi, \pi]$, *i.e.*,

$$u(n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)e^{-inx} dx = \left(\frac{F}{f} \right) (n),$$

donde \mathcal{F} es la transformada de Fourier de f respecto de n , así podemos asociar a cada $f \in L^2[-\pi, \pi]$, un único elemento $u \in l^2(\mathbb{Z})$. De hecho, hemos obtenido un operador unitario natural a través de la transformada de Fourier $\mathcal{F}: L^2[-\pi, \pi] \rightarrow l^2(\mathbb{Z})$,

$$\|\mathcal{F}f\|_{l^2(\mathbb{Z})} = \|u\|_{l^2(\mathbb{Z})} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} |u(n)|^2 = \|f\|_{L^2[-\pi, \pi]}.$$

Demostremos ahora que $\mathcal{F}^{-1}\Delta_d\mathcal{F}$ es un operador de multiplicación por $2(\cos n - 1)$. A saber,

$$\begin{aligned} (-\Delta_d\mathcal{F}f)(n) &= (-\Delta_d)(\mathcal{F}f(n)) = (-\Delta_d)\left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)e^{-inx} dx\right) \\ &= (-\Delta_d)(u(n)) = (-\Delta_d u)(n) = u(n+1) + u(n-1) - 2u(n) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)e^{-i(n+1)x} dx + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)e^{-i(n-1)x} dx - 2\left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)e^{-inx} dx\right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)e^{-inx}(e^{-ix} + e^{ix} - 2) dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)(2\cos x - 2)e^{-inx} dx \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)2(\cos x - 1)e^{-inx} dx = \mathcal{F}(2(\cos(\cdot) - 1)f(\cdot))(n), \end{aligned}$$

i.e.,

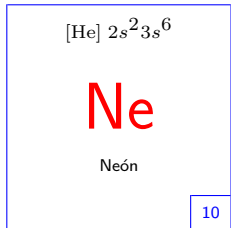
$$\left(\mathcal{F}^{-1}(-\Delta_d)\mathcal{F}f\right)(n) = 2(\cos n - 1)f(n),$$

de esta manera, hemos *diagonalizado* el operador $-\Delta_d$

$$\begin{array}{ccc} L^2[-\pi, \pi] & \xrightarrow{2(\cos n - 1)} & L^2[-\pi, \pi] \\ \mathcal{F} \downarrow & & \downarrow \mathcal{F} \\ l^2(\mathbb{Z}) & \xleftarrow{-\Delta_d} & l^2(\mathbb{Z}) \end{array}$$

donde $\mathcal{F}^{-1}(-\Delta_d)\mathcal{F} = 2(\cos(\cdot) - 1)$. Así $(-\Delta_d)$ y $2(\cos(\cdot) - 1)$ son unitariamente equivalentes. Por los resultados anteriores

$$\sigma(-\Delta_d) = \text{ranesen}(2(\cos m - 1)) = [-4, 0] \quad \blacksquare$$



peso atómico: 20.1797
 punto de fusión: -248.61 °C
 punto de ebullición: -246.05 °C

APÉNDICE

La notación y los espacios de funciones

La notación estándar de multi-índices: un multi-índice es una n -ada de enteros no negativos $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$. La colección de todos los multi-índices se denota por I_+^n . Se Definen los siguientes símbolos para los multi-índices

$$\begin{aligned} \|\alpha\| &= \sum_{i=1}^n \alpha_i, \\ x^\alpha &= x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \cdots x_n^{\alpha_n}, \\ D^\alpha &= \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \cdots \partial x_n^{\alpha_n}}, \\ x^2 &= \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{aligned}$$

y

$$C^\infty(\mathbb{R}^n) := \{f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbf{C}: \exists D^\alpha f \text{ continua } \forall \alpha \in I_+^n\}.$$

El espacio de Schwartz, $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) := \{f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbf{C}: f \in C_\infty(\mathbb{R}^n) \text{ y de rápido decrecimiento a cero en infinito }\}$, o más precisamente

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) := \left\{ f \in C^\infty(\mathbb{R}^n): \forall \alpha, \beta \in I_+^n, \sup |x^\beta D^\alpha f(x)| < \infty \right\}.$$

El espacio de Hilbert

$$L^2(\mathbb{R}^n) := \left\{ f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbf{C}: f \text{ es Lebesgue medible y } \int_{\mathbf{R}^n} |f(x)|^2 dx < \infty \right\},$$

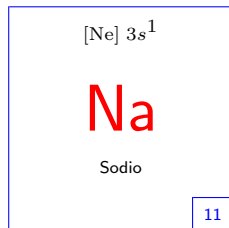
con el producto escalar

$$\langle f, g \rangle_{L^2(\mathbf{R}^n)} := \int_{\mathbf{R}^n} f(x) \overline{g(x)} dx,$$

donde $\overline{(\cdot)}$ es el complejo conjugado.

$\mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n)$ es llamado el espacio de Sobolev de segundo orden. Es un espacio de Hilbert definido por

$$\mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n) := \left\{ f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbf{C}: f, Df \text{ y } D^2 f \in L^2(\mathbb{R}^n) \right\},$$



peso atómico: 22.989768
 punto de fusión: 97.83 °C
 punto de ebullición: 897.4 °C

con el producto escalar, y se caracteriza en términos de la transformada de Fourier como

$$\mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n) := \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^n) : \int_{\mathbb{R}^n} (1 + |p|^2)^2 |(\mathcal{F}f)(p)|^2 dp < \infty \right\}.$$

Finalmente se tiene la siguiente cadena de contenciones propias

$$C^\infty(\mathbb{R}^n) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n).$$

Resultados elementales sobre la transformada de Fourier

Los siguientes resultados fueron extraídos de [Reed y Simons, 1975]

Consideremos el espacio de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, de las funciones $C^\infty(\mathbb{R}^n)$ de rápido decrecimiento.

Definición. La transformada de Fourier, como un operador lineal $\mathcal{F} \equiv \widehat{(\cdot)}$ definido en $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ sobre el propio $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ y definido como

$$(\mathcal{F}f)(\lambda) \equiv \widehat{f}(\lambda) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\mathbf{x} \cdot \lambda} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

donde $\mathbf{x} \cdot \lambda = \sum_{i=1}^n x_i \lambda_i$ y llamaremos a $(\mathcal{F}f)(\lambda) \equiv \widehat{f}(\lambda)$, la transformada de Fourier de f . Y la transformada de Fourier inversa de f , que denotaremos por $(\mathcal{F}^{-1}f)(\lambda) \equiv \check{f}(\lambda)$, la definiremos como

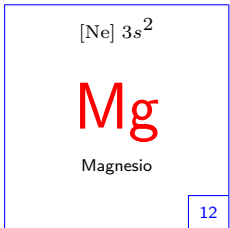
$$(\mathcal{F}^{-1}f)(\lambda) \equiv \check{f}(\lambda) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{\mathbf{x} \cdot \lambda} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Definiciones y resultados básicos sobre operadores lineales

En las siguientes definiciones \mathcal{H} denotará un espacio de Hilbert complejo separable y T un operador lineal definido en $D(T) \subset \mathcal{H}$, sobre algún subespacio lineal de \mathcal{H} .

Definición. La gráfica de un operador lineal T se define como

$$\Gamma(T) \equiv \{(\varphi, \psi) : T\varphi = \psi\}.$$



peso atómico: 24.305
 punto de fusión: 650 °C
 punto de ebullición: 1105 °C

Definición. Un operador T es cerrado, si su gráfica es un conjunto cerrado en $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ en su correspondiente topología.

Definición. Un operador T es acotado, si existe un número real no negativo $\|T\|$ definido por

$$\|T\| \equiv \sup_{\varphi \neq 0} \frac{\|T\varphi\|_{\mathcal{H}}}{\|\varphi\|_{\mathcal{H}}},$$

tal que

$$\|T\varphi\|_{\mathcal{H}} \leq \|T\| \|\varphi\|_{\mathcal{H}} \quad \forall \varphi \in D(T),$$

donde $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$ es la norma de \mathcal{H} .

Definición. Sea T un operador definido en subconjunto denso de \mathcal{H} . Definamos el siguiente subconjunto $D(T^*)$ de \mathcal{H} ,

$$D(T^*) = \{\psi: \exists \gamma \in \mathcal{H} \text{ tal que } \langle T\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, \gamma \rangle \quad \forall \varphi \in D(T)\},$$

donde \langle, \rangle es el producto escalar de \mathcal{H} y definimos el operador T^* en $D(T^*)$ por

$$T^*\psi = \gamma,$$

a T^* le llamamos el operador adjunto de T .

Definición. Sea T un operador definido en subconjunto denso de \mathcal{H} . Un operador es llamado *simétrico* o *hermítico* si

$$T \subset T^*,$$

i.e., si

$$D(T) \subset D(T^*) \quad \text{y} \quad T\varphi = T^*\varphi \quad \forall \varphi \in D(T).$$

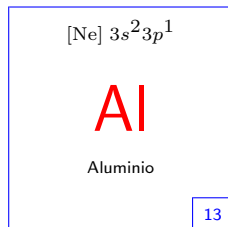
O equivalentemente, T es simétrico si, y solo si,

$$\langle T\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, T\psi \rangle \quad \forall \varphi, \psi \in \mathcal{H}.$$

Definición. Un operador T es autoadjunto si

$$T = T^*,$$

i.e., si T es autoadjunto si, y solo si T es un operador simétrico y $T \supset T^*$.



peso atómico: 26.981539
 punto de fusión: 660.37 ° C
 punto de ebullición: 2517.6 ° C

Definición.

$$\mathcal{B}(\mathcal{H}) \equiv \{T: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}: T \text{ es acotado}\},$$

el cual es un espacio de Banach.

Definición. Un operador $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ es unitario si $\mathcal{R}(T) = \mathcal{H}$ y

$$\|T\varphi\| = \|\varphi\| \quad \forall \varphi \in \mathcal{H},$$

donde $\mathcal{R}(T)$ es el rango de T .

El espectro de un operador [Reed y Simon, 1972]

Sea un operador autoadjunto T sobre \mathcal{H} .

Definición. Si T un operador cerrado sobre \mathcal{H} ,

$$\rho(T) \equiv \{\lambda \in \mathbb{C}: (T - \lambda I): D(T) \rightarrow \mathcal{H} \text{ es inyectiva y } (T - \lambda I)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})\};$$

a $\rho(T)$ se le llama el *conjunto resolvente*.

Definición. Si $\lambda \in \rho(T)$,

$$R_\lambda(T) \equiv (T - \lambda I)^{-1},$$

$R_\lambda(T)$ es llamada la *resolvente* de T en λ y, en general, se define como

$$R_z(T) \equiv (T - zI)^{-1},$$

la cual es una función analítica para $z \in \rho(T)$ con valores en $\mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Definición. El espectro de T , se define como

$$\sigma(T) \equiv \mathbb{C} - \rho(T),$$

el cual es un *conjunto cerrado*.

Definición. $\sigma_d(T) := \{ \text{autovalores con multiplicidad finita de } T \text{ que son puntos aislados de } \sigma(T) \}$, le llamaremos el *espectro discreto* de T .

Definición.

$$\sigma_{ese} = \sigma(T) - \sigma_d(T),$$

llamaremos el *espectro esencial*.

[Ne] 3s²3p²

Si

Silicio

14

peso atómico: 28.0855
punto de fusión: 1411 °C
punto de ebullición: 3231 °C

Agradecimientos

Los autores agradecen las correcciones y los comentarios del árbitro, los cuales fueron fundamentales para la publicación de este artículo. También externan su gratitud al Dr. Jaime Cruz Sampedro (sampedro@uaeh.reduaeh.mx) de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, por su valiosa ayuda.

El presente trabajo fue posible gracias al apoyo recibido por los autores, a través de la *Cátedra Patrimonial SEP-CONACyT*, Nivel II, Ref: SC-980004.

REFERENCIAS

- [1] Arredondo, J. H., *Teoría de operadores con aplicaciones a la Física*, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, México, D.F., 1997.
- [2] Carmona, R. y J. Lacroix J., “Spectral Theory of Random Schrödinger Operators”, *Probability and its Applications*, Birkhäuser, Boston, 1990.
- [3] Combes, J. M. y P. D. Hislop, *Notes: Localization Properties of Random Media*, Département de Mathématiques, Université de Toulon et du Var, 83130 La Garde France, Mathematics Department, University of Kentucky, Lexington, KY 40506-0027, EUA, 1997.
- [4] Cycon, H. L., R. G. Froese, W. Kirsch y B. Simon, *Schrödinger Operators With Applications to Quantum Mechanics and Global Geometry*, Texts and Monographs in Physics, Springer-Verlag, Nueva York-Berlín-Heidelberg, 1987.
- [5] Hislop, P. D. e I. M. Sigal, *Introduction to Spectral Theory: With Applications to Schrödinger Operators*, Applied Mathematics Sciences, vol. 113, Springer-Verlag, Nueva York, 1996.
- [6] Kato, T., *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer-Verlag, Nueva York, 1966.
- [7] Reed, M. y B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. I, Academic Press, Nueva York-Londres, 1972.
- [8] ———, *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. II, Academic Press, Nueva York-San Francisco-Londres, 1975.
- [9] Ruiz, G., “Sección de Problemas Propuestos”, *Eureka* **11**, Universidad Autónoma de Querétaro, Santiago de Querétaro, México (1997), pág. 4.

[Ne] $3s^2 3p^3$

P

Fósforo

15

peso atómico: 30.973762
 punto de fusión: 44.2 °C
 punto de ebullición: 280.5 °C