

LAS DESIGUALDADES ENTRE OPERADORES COMO MEDIO DE FIJAR LIMITES PARA LOS VALORES PROPIOS

Conferencia pronunciada en el VII Congreso Nacional de Física

Guillermo Castillo T.
Departamento de Física
Universidad Nacional de Colombia

1. Desigualdades entre operadores [1]

Sean dos operadores autoadjuntos A y B.
Se dice que $A \leq B$ (1)

$$\text{Si } \langle \psi | A | \psi \rangle \leq \langle \psi | B | \psi \rangle \quad (2)$$

para todo $|\psi\rangle$ del espacio de Hilbert que pertenezca a la intersección de los dominios de los 2 operadores.

He aquí algunas propiedades útiles:

- a) Si $A \leq B$ y $B \leq A$, entonces $A = B$
- b) Si $A \leq B$ y $B \leq C$, entonces $A \leq C$
- c) Se llama cota superior de A, $M(A)$, el máximo valor de $\langle \psi | A | \psi \rangle$ para $\|\psi\| = 1$
- d) Se llama cota inferior de A, $m(A)$, el mínimo valor de $\langle \psi | A | \psi \rangle$ si $\|\psi\| = 1$
- e) Para todo valor propio λ de A, vale $m(A) \leq \lambda \leq M(A)$
- f) Si $A \geq 0$
 $|\langle \psi | A | \varphi \rangle|^2 \leq \langle \psi | A | \psi \rangle \langle \varphi | A | \varphi \rangle$ para todo ψ y φ del dominio de A
- g) Sea $\Omega = A - B$, positivamente definido, $\Omega > 0$ y $|\psi\rangle = T|\varphi\rangle$, siendo T un operador que admite un inverso.

$$\text{Entonces } \langle \psi | \Omega | \psi \rangle = \langle \varphi | T^* \Omega T | \varphi \rangle$$

$$\text{Luego si } A > B, \langle \varphi | T^* \Omega T | \varphi \rangle > 0 \quad (3)$$

$$\text{o bien } T^* A T > T^* B T \quad (4)$$

- h) Si en (3) hacemos $T = \Omega^{-1}$
 $\langle \varphi | (\Omega^{-1})^* \Omega \Omega^{-1} | \varphi \rangle > 0$
pero $\langle \varphi | (\Omega^{-1})^* \Omega \Omega^{-1} | \varphi \rangle = \langle \psi | \Omega^{-1} | \psi \rangle > 0$
o bien si $\Omega > 0, \Omega^{-1} > 0$

2. Raíz cuadrada de un operador [1]

Para B autoadjunto $B^2 \leq 0$
Entonces surge la pregunta: Todo operador autoadjunto no negativo es el cuadrado de otro operador autoadjunto? La respuesta es: Dado $A \geq 0$, autoadjunto, existe un único B autoadjunto tal que $B^2 = A$
Tiene sentido pues la notación $B = A^{1/2}$ para la raíz cuadrada positiva.

3. Otras propiedades de las desigualdades [4]

- a) Si $A > 1$, sabemos que $A^{1/2}$ existe y es autoadjunto si A lo es. Pongamos ahora

$$T = A^{-1/2} \text{ en (4):}$$

$$(A^{-1/2})^* A A^{-1/2} > 1 \text{ y de ahí } 1 > A^{-1}$$

- b) Sea $A > B > 0$
Poniendo $T = B^{-1/2}$ en (4)
 $(B^{-1/2})^* A B^{-1/2} > (B^{-1/2})^* B B^{-1/2}$ o bien
 $B^{-1/2} A B^{-1/2} > 1$
y de 3 a)
 $(B^{-1/2} A B^{-1/2})^{-1} < 1$ o bien
 $B^{1/2} A^{-1} B^{1/2} < 1$ es decir
 $B^{1/2} A^{-1} B^{1/2} < B^{-1/2} B^{-1} B^{-1/2}$, lo que significa en virtud de 1 g) $A^{-1} < B^{-1}$
En resumen: si $A > B > 0$
 $B^{-1} > A^{-1} > 0 \quad (5)$

4. Ordenación de los valores propios [2,3]

La idea de usar las propiedades de los párrafos anteriores para obtener desigualdades entre valores propios, se remonta probablemente a Weyl en 1912.

Dados $A < B$

Si los valores propios de A y B son a_k y b_k respectivamente, entonces

$$a_k < b_k \quad (6)$$

Demostración.

Como a_k y b_k son valores propios

$$A u_k = a_k u_k \quad B v_k = b_k v_k \quad (7)$$

Del principio variacional podremos deducir para el valor propio más pequeño

$$a_1 \leq \langle v_1 | A | v_1 \rangle, \quad b_1 = \langle v_1 | B | v_1 \rangle \quad (8)$$

lo que usando (2) nos da

$$a_1 < b_1$$

Después se considera la función auxiliar $\varphi_2 = v_1 \beta_1 + v_2 \beta_2$ normalizada y ortogonal con v_1 . Por esta última razón, usando de nuevo el principio variacional

$$a_2 \leq \langle \varphi_2 | A | \varphi_2 \rangle < \langle \varphi_2 | B | \varphi_2 \rangle$$

Pero $\langle \varphi_2 | B | \varphi_2 \rangle = b_1 |\beta_1|^2 + b_2 |\beta_2|^2 \leq b_2$,

ya que por la normalización de φ_2 sabemos que $|\beta_1|^2 + |\beta_2|^2 = 1$ y suponemos $b_1 < b_2$.

Es decir $a_2 < b_2$

Luego se considera $\varphi_3 = v_1 \beta_1 + v_2 \beta_2 + v_3 \beta_3$, normalizada y ortogonal a u_1 y u_2 y se llegará a $a_3 < b_3$ etc.

5. Proyecciones interiores

A. Weinstein, N. Aronszajn, N. W. Bazley [2] y posteriormente P.O. Löwdin [3,4], usaron el concepto de proyección interior.

Sea A un operador autoadjunto definitivamente positivo, $A > 0$. Si Q es un operador de proyección, la expresión $A^1 = A^{1/2} Q A^{1/2}$ se llama "proyección interior de A respecto al proyecto Q ".

Para el operador de proyección "exterior" Q sabemos que

$$\langle \psi | Q | \psi \rangle = \langle \psi | Q^2 | \psi \rangle = \langle \psi | Q^* Q | \psi \rangle = \langle Q \psi | Q \psi \rangle \geq 0$$

Como esto también vale para el proyecto $P = 1 - Q$ en el subespacio complemento ortogonal, resulta

$$0 \leq Q \leq 1 \quad (10)$$

Esto significa que, según (4) con $T = A^{1/2}$ y $T^* = A^{1/2}$

$$0 \leq A^{1/2} Q A^{1/2} \leq A \quad (11)$$

Las ecuaciones (6) y (11) son el fundamento de varios métodos para fijar cotas inferiores a los valores propios, algunos de los cuales describiremos abajo. Pero antes veamos algunas formas alternativas del operador A^1 :

Sea pues un conjunto de estado que determinan un sub-espacio

$$\underline{f} = \{ f_1, f_2, \dots, f_n \} \quad (12)$$

Este conjunto posee una matriz

$$\underline{\Delta} = \langle \underline{f} | \underline{f} \rangle \text{ con elementos } \Delta_{k_1} = \langle f_k | f_{k_1} \rangle$$

Sea un vector g que descomponemos en uno g_f , contenido en el sub-espacio (12) y otro g_l , perpendicular al 1o.

Hagamos $g_f = \underline{f} \underline{c}$, donde \underline{f} es la matriz fila con los elementos f^*_1, \dots, f^*_n y \underline{c} la matriz columna de los coeficientes del desarrollo de g_f por medio de los f

$$\text{Entonces } \langle \underline{f} | g \rangle = \langle \underline{f} | \underline{f} \rangle \underline{c} + \langle \underline{f} | g_l \rangle = \underline{\Delta} \underline{c}$$

$$\text{así que } \underline{c} = \underline{\Delta}^{-1} \langle \underline{f} | g \rangle \text{ y } g_f = \underline{f} \underline{\Delta}^{-1} \langle \underline{f} | g \rangle$$

$$\text{Entonces el operador } Q = \underline{f} \underline{\Delta}^{-1} \langle \underline{f} | \text{ (con la condición } Qg = \underline{f} \underline{\Delta}^{-1} \langle \underline{f} | g \rangle = g_f)$$

cumple los requisitos para ser el proyector sobre el sub-espacio dado. Entonces, en la expresión de la proyección interior,

$$A^1 = A^{1/2} \underline{f} \langle \underline{f} | \underline{f} \rangle^{-1} \langle \underline{f} | A^{1/2} \quad (13)$$

podemos hacer varias substituciones:

$$\begin{aligned} \text{a) } \underline{f} &= A^{1/2} \underline{g} \\ \text{con lo cual } A^1 &= A | \underline{g} \rangle \underline{\Delta}^{-1} \langle \underline{g} | A \\ \text{donde } \underline{\Delta} &= \langle \underline{g} | A | \underline{g} \rangle \end{aligned} \quad (14)$$

$$\text{b) } \underline{f} = A^{-1/2} \underline{h}$$

$$A^1 = | \underline{h} \rangle \underline{\Delta}^{-1} \langle \underline{h} | \text{ donde } \underline{\Delta} = \langle \underline{h} | A^{-1} | \underline{h} \rangle \quad (15)$$

Estas formas se usan en los métodos que describo en el párrafo siguiente.

6. Método de los hamiltonianos intermedios [2, 5]

Este método sirve para encontrar cotas inferiores de los valores propios. Los métodos variacionales nos permiten encontrar cotas superiores, pero como observan Bazley y Fax [2] sin cotas inferiores no es posible una estimación sobre la exactitud del cálculo.

La ecuación de valores propios para el hamiltoniano completo es

$$H \psi_i = E_i \psi_i \quad (16)$$

Supongamos que hemos ordenado esos valores propios

$$E_1 \leq E_2 \leq \dots$$

Los valores degenerados aparecen un número de veces igual a su multiplicidad.

Supongamos también que el Hamiltoniano H se puede escribir

$$H = H^0 + H^1 \quad (17)$$

Donde H^1 es definitivamente positivo pero no necesariamente pequeño.

El problema de valores propios para H^0 se supone resuelto

$$H^0 \psi_i^0 = E_i \psi_i^0 \quad (18)$$

y los respectivos niveles de energía los suponemos ordenados

$$E_1^0 \leq E_2^0 \leq \dots$$

y que además suponemos están abajo del espectro continuo. En virtud de (6), como $H^0 \leq H$,

$$E_1^0 \leq E_1 \quad (19)$$

Así que los valores propios de H^0 producen un acotamiento por debajo (bastante impreciso) de los valores propios de H .

El método consiste en elegir un conjunto de "Hamiltonianos intermedios" H^k , tales que

$$H^0 \leq H^k \leq H^{k+1} \leq H$$

Los valores propios de estos Hamiltonianos intermedios están situados entre los E_i y los E_i^0 .

Definimos los Hamiltonianos intermedios

$$H^k = H^0 + H^1 P^k$$

siendo P^k un proyector sobre un cierto subespacio de dimensión k , que luego determinamos de la manera más conveniente. El operador P^k se puede poner

$$P^k = |g\rangle \langle g| H^1 |g\rangle^{-1} \langle g| H^1$$

(verifíquese que $P^k = (P^k)^2$)

$$\text{Entonces } H^1 P^k = H^1 |g\rangle \langle g| H^1 |g\rangle^{-1} \langle g| H^1 \quad (20)$$

que es de la forma (14) para la proyección interna y $H^1 P^k < H^1$.

El problema de valores propios se plantea así:

$$\begin{aligned} H^k \psi_i^1 &= (H^0 + H^1 P^k) \psi_i^1 = E_i^k \psi_i^1 \\ \text{o sea } (E_i^k - H^0) \psi_i^1 &= H^1 P^k \psi_i^1 \\ \text{o bien } \psi_i^1 &= (E_i^k - H^0)^{-1} H^1 P^k \psi_i^1 \end{aligned} \quad (21)$$

De (20) y (21)

$$|\psi_i^1\rangle = (E_i^k - H^0)^{-1} H^1 |g\rangle \underline{a} \quad \text{donde}$$

$$\underline{a} = \langle g| H^1 |g\rangle^{-1} \langle g| H^1 |\psi_i^1\rangle.$$

Multiplicado por la izquierda por

$$\langle g| H^1 |g\rangle^{-1} \langle g| H^1,$$

$$\underline{a} = \langle g| H^1 |g\rangle^{-1} \langle g| H^1 (E_i^k - H^0)^{-1} H^1 |g\rangle \underline{a},$$

o bien

$$\{ \langle g| H^1 |g\rangle - \langle g| H^1 (E_i^k - H^0)^{-1} H^1 |g\rangle \} \underline{a} = 0.$$

Como $\underline{a} \neq 0$

$$\det [\langle g| H^1 - H^1 (E_i^k - H^0)^{-1} H^1 |g\rangle] = 0,$$

Ecuación secular del problema de donde salen los E_i^k .

7. Aproximación de Padé [6,7]

Esta aproximación que Padé sugirió desde el siglo pasado, se puede estudiar con ayuda del operador de proyección interna.

Veamos primero cuál fue la idea de Padé. Sea una función $j(z)$ que admite un desarrollo en serie

$$j(z) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l z^l. \quad (22)$$

Se llama "aproximante de Padé" $[N, M]$ de esta función el cociente de dos polinomios $P(z)$ y $Q(z)$ de grados M y N respectivamente,

$$[N, M] = \frac{P(z)}{Q(z)} \sim j(z) \quad (23)$$

con $Q(0) = 1$.

Se demuestra que se puede elegir $[N, M]$ de manera que coincida con $j(z)$ hasta la potencia $M + N$.

El reemplazar la serie original por el aproximante es muy ventajoso cuando dicha serie converge muy lentamente o no converge en absoluto. En el caso de desarrollo en serie de operadores, esta sustitución conserva la unitariedad.

En las referencias [6] y [7] se muestra cómo se puede expresar $[N, M]$ como un producto de determinantes.

Las condiciones de convergencia de $[N, M]$ al crecer N y M son muy bien conocidas cuando (22) es una serie de Stieljes

$$f(-z) = g(z) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j (-z)^j, \quad (24)$$

donde los coeficientes a_j son los momentos de una distribución,

$$a_j = \int_0^{\infty} u^j d\varphi(u).$$

$\varphi(u)$ es una función acotada no decreciente.

Para usar el método de las proyecciones internas se introduce un operador R no negativo y se aplican las fórmulas (11) y (15)

$$R \geq |h\rangle \langle h| R^{-1} |h\rangle^{-1} \langle h| \quad (25)$$

$$\text{Luego se hace } R = R(z) = (1 + z A)^{-1} \quad (26)$$

Consideremos una propiedad física dada por

$$g(z) = \langle \psi | R(z) | \psi \rangle. \quad (27)$$

Desarrollando el denominador de R

$$g(z) = \sum (-z)^l \langle \psi | A^l | \psi \rangle. \quad (28)$$

Entonces $\langle \psi | A^l | \psi \rangle$ corresponde al a_l de (22).

En el operador de la proyección interior (15) es cogemos

$$|h_1\rangle = A^{l-1} | \psi \rangle$$

y usando (25) se llega a

$$[N, N] \geq g(z) \geq [N, N-1], \quad (29)$$

propiedad que se puede deducir también [6, 7] por manipulación de los determinantes.

La aproximación de Padé se ha utilizado entre otras muchas cosas, para el caso de los desarrollos en serie que aparecen en la teoría de perturbaciones, donde los aproximantes $[N, N]$ y $[N, N-1]$ sirven de cota superior e inferior respectivamente [8]. Análoga situación se presenta en el desarrollo de polarizabilidades por medio de los momentos.

8. Método de Partición [4, 5]

En el método de los Hamiltonianos intermedios, en general se requiere ordenar los valores propios de los Hamiltonianos H^0 y H^k , lo que en general presupone que se hayan determinado todos esos valores propios. Con el objeto de evitar ese problema, P.O. Löwdin [4,5], propuso como alternativa la introducción de una función de "bracketing" $\xi = f(\mathcal{E})$ donde \mathcal{E} es una función que se extiende sobre todo el plano complejo. Tal función cumple la condición de que entre \mathcal{E} y ξ se halla siempre un valor propio de H . El autor de este último método sostiene también que en él se atenúan las dificultades que se han presentado en el método de los Hamiltonianos intermedios para introducir adecuadamente las contribuciones de la parte continua de H^0 .

Para todos esos fines, se introduce el "operador resolvente reducido"

$$T = (\mathcal{E} - PHP)^{-1} P$$

siendo P un operador de proyección.

En el caso de una perturbación V definitivamente positiva

$$H = H^0 + V$$

se tiene, según se demuestra en los artículos originales

$$\xi_1 = E_0 + \langle \varphi_0 | t | \varphi_0 \rangle$$

t es el "operador de reacción"

$$t = V + VTV = (1 - V R_0)^{-1} V$$

$$\text{Si } T_0 = (\mathcal{E} - PH_0P)^{-1} P$$

E_0 y $|\varphi_0\rangle$ son un valor propio y un ket propio de H^0 .

También se demuestra $t^{-1} = V^{-1} - T_0$.

Además, de las propiedades de las desigualdades entre operadores sale $\xi < E_1^0$, siendo E_1^0 la energía del estado fundamental.

$$T_0 < 0$$

$$t^{-1} > V^{-1} > 0$$

$$\text{o bien } 0 < t < V$$

Luego aplicando el concepto de proyección interior, se logran límites inferiores más precisos para t .

Esta teoría tiene como casos particulares las teorías de perturbaciones tipo Brillouin y tipo Schrödinger.

En la referencia [4] se indica dónde se describen algunas aplicaciones de este método.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Las demostraciones de estos dos párrafos se dan en los libros de análisis funcional como F. Riesz & B. Sz. — Nagy. Functional Analysis. New York. Ungan Publ. Las demostraciones de 1-g) y 1-f) están en [4].
- [2] N.W. Bazley. Phys. Rev. 120, 144 (1960)
N.W. Bazley, D.W. Fox. Phys. Rev. 124, 433 (1962).
- [3] P.O. Löwdin. Phys. Rev. 139, A 357 (1965).
- [4] P.O. Löwdin. Intern. J. Quantum Chem. II, 867 (1968).
- [5] P.O. Löwdin J. Chem. Phys. 43, 10, Suppl. (1965).
- [6] The Padé Approximant in Theoretical Physics. Ed. G.A. Baker and Y.L. Gammel. Academic Press. (N.Y.).
- [7] O. Goscinski, E. Brändas. Intern. J. Quantum Chem. V, 131, (1971).
- [8] E. Brändas y O. Goscinski. Phys. Rev. A1. 552 (1970).
- [9] O. Goscinski. Intern. J. Quantum Chem. II, 761 (1968).