



CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DE
ESTUDIOS AVANZADOS DEL INSTITUTO
POLITÉCNICO NACIONAL

UNIDAD ZACATENCO

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS

TEORÍA ESPECTRAL DE GRAFOS CUÁNTICOS

TESIS

Que presenta

VÍCTOR ALFONSO VICENTE BENÍTEZ

Para obtener el grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

EN LA ESPECIALIDAD DE

MATEMÁTICAS

Director de la tesis:

Dr. Vladyslav Kravchenko Cherkasski

CIUDAD DE MÉXICO.

JULIO DE 2018.

“Teoría espectral de grafos cuánticos”

Víctor Alfonso Vicente Benítez
Departamento de matemáticas
CINVESTAV, unidad Querétaro

Julio de 2018

*Dedicado al Dios todopoderoso,
rey de reyes y señor de señores,
porque tuyos son la inteligencia y sabiduría;
y a mis padres,
por su amor, comprensión y apoyo.*

Agradecimientos

Quiero agradecer primeramente a aquel que me ha dado la vida, el valor y la sabiduría para poder llegar hasta aquí, y que ha sido mi amparo y mi fortaleza en todo momento: a mi Dios, mi señor Jesucristo. Gracias Dios, porque tu me has guiado estos 2 años en este camino, y me has mostrado tus maravillas y que tu eres Dios de toda ciencia, pues tuyos son la inteligencia y la sabiduría. Dedico esta tesis para honra y gloria tuya mi Dios.

Agradezco a mi mamá, Imelda Benítez. Gracias mamá, porque aunque ha sido difícil separarme del hogar estos 2 años, siempre me has animado y apoyado en todo momento para seguir adelante con este sueño que empezó hace 7 años, y me alientas a poner todo en las manos de Dios y a confiar en él. Nuevamente podemos decirlo mamá, hoy nos graduamos de la maestría tu y yo, te amo mamá.

A mi papá, Víctor Vicente. Gracias papá, por todos tus consejos, por animarme a perseguir mis sueños, por tus oraciones y tu cariño. Este triunfo es también tuyo, te amo papá.

A mis abuelitos, Nicolás y Ausencia, porque a pesar de las pruebas y dificultades de los últimos años, siempre están apoyandome y animandome a seguir adelante y superarme, los amo.

Quiero agradecer a mi asesor de tesis, el Dr. Vladislav V. Kravchenko, por todos los conocimientos que ha compartido conmigo, por su apoyo, sus consejos y por introducirme al mundo de la investigación matemática. Realmente es un honor y un verdadero placer trabajar con usted.

Agradezco de igual forma a mis sinodales, Dr. Sergii M. Torba, por sus comentarios, sugerencias y correcciones que mejoraron los resultados presentados en esta tesis, y al Dr. Víctor Barrera Figueroa, por haber revisado este trabajo y por las recomendaciones para mejorar el mismo.

Agradezco también a todos los profesores que me acompañaron durante esta formación de maestría: Dr. Juan Manuel Burgos, Dra. Maribel Loaiza, Dr. Héctor Jasso, Dr. Carlos Pacheco, y en especial al Dr. Michael Porter, por todas las lecciones dadas en estos 2 años.

No puedo olvidar a mis compañeros del CINVESTAV Unidad Querétaro, que me acompañaron en esta etapa de maestría: Flor, Briceyda, Edilberto, Pablo, Igor, Josafath, Nelson, Miriam, Víctor, María Luisa, Laura y a Montserrat, gracias por todos los buenos momentos compartidos.

Quiero también mencionar a mis tíos y familiares de Juchitan, Ixtaltepec, y a mis hermanos de la Iglesia la Nueva Filadelfia, gracias por sus oraciones hermanos, los amo en el amor del Señor.

Y por supuesto, también a mi hermanita mayor, Sushima. Gracias hermana por estar siempre conmigo y apoyarme a pesar de la distancia, te quiero hermanita.

Por último, quiero agradecer al CINVESTAV Unidad Querétaro, por ser un segundo hogar para mí durante estos 2 años, y al CONACYT por el apoyo económico brindado para poder realizar mis estudios de maestría.

Resumen

La teoría de grafos cuánticos es una de las ramas de la matemática actual que en el último par de décadas ha tenido un gran crecimiento, debido principalmente a las diversas aplicaciones que se le puede dar en áreas tan diversas como la física, química, ingeniería, nanotecnología, entre otras muchas. En el presente trabajo se realiza un estudio acerca de algunos resultados principales de esta teoría.

Se define un grafo cuántico, como un grafo dirigido $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{B})$ con una cantidad contable de vértices y conexo, cuyas aristas son dotadas de una longitud finita, y sobre el cual está definido un operador diferencial llamado hamiltoniano \mathcal{H} , junto con algunas condiciones en los vértices. Se propone una definición para el espacio métrico asociado y se estudian sus principales propiedades, caracterizando las funciones continuas sobre Γ por medio de familias de funciones definidas en las aristas. Además, se estudia el espectro $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ de un grafo cuántico periódico, cuyo hamiltoniano está dado por el operador de Schrödinger $\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$ con un potencial real, dotado con las condiciones de Neumann-Kirchhoff en los vértices, obteniendo una cota inferior para el espectro y demostrando que, para el caso de un grafo compacto, dicho espectro es puramente discreto.

Posteriormente se analizan las propiedades de los grafos cuánticos periódicos, principalmente el hecho de que para este caso, el espectro es puramente esencial y posee una estructura *band-gap*. Empleando estos resultados, se construye una ecuación de dispersión para el cálculo del espectro del operador de Schrödinger periódico, obteniendo para el caso de un grafo unilateral y equilateral, una ecuación característica de la forma $\eta(\lambda) = f(\theta)$, donde la función η es holomorfa en el parámetro espectral λ , f es una función continua y $\theta \in \mathbb{B}$, con \mathbb{B} la zona de Brillouin del grafo. Además, se obtiene una representación para la función η por medio de series de Neumann de funciones de Bessel esféricas, la cual puede ser empleada para el cálculo numérico del espectro. Finalmente, mostramos que si el grafo Γ es equipotencial y admite ciclos, el espectro de Dirichlet $\mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$ está contenido en el espectro $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$, y sus elementos corresponden a valores propios de multiplicidad infinita.

Abstract

Quantum graphs theory is one of the branches of the current mathematics that in the last couple of decades has had a great growth, mainly due to the diverse applications that can be given in areas as physics, chemistry, engineering, nanotechnology, and many others. In the present work we made a study about some main results of this theory.

A quantum graph is defined as a directed graph $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{B})$ with a countable number of vertices and connected, whose edges are endowed with a finite length, and on which a differential operator called Hamiltonian \mathcal{H} is defined, along with some conditions at the vertices. A definition for the associated metric space is proposed and its main properties are studied, characterizing the continuous functions on Γ by means of families of functions defined in the edges. In addition, we study the spectrum $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ of a periodic quantum graph, whose Hamiltonian is given by the Schrödinger operator $\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$ with a real potential, endowed with the Neumann-Kirchhoff conditions at the vertices, obtaining a lower bound for the spectrum and proved that, in the case of a compact graph, the spectrum is purely discrete.

Subsequently, the properties of periodic quantum graphs are analysed, mainly the fact that for this case, the spectrum is purely essential and has a *band-gap* structure. Using these results, a dispersion equation is constructed for the calculation of the spectrum of the periodic Schrödinger operator, obtaining for the case of a unilateral and equilateral graph, a characteristic equation of the form $\eta(\lambda) = f(\theta)$, where the function η is holomorphic in the spectral parameter λ , f is a continuous function and $\theta \in \mathbb{B}$, with \mathbb{B} the Brillouin zone of the graph. In addition, a representation for the function η is obtained by means of Neumann series of spherical Bessel functions, which can be used for the numerical calculation of the spectrum. Finally, we show that if the Γ graph is equipotential and contains cycles, the Dirichlet spectrum $\mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$ is contained in the spectrum $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$, and its elements correspond to eigenvalues of infinite multiplicity.

Índice general

Resumen	IV
Abstract	V
Introducción	1
1. Preliminares	5
1.1. Nociones básicas de teoría de grafos	5
1.2. Operadores no acotados	7
1.3. Operadores de transmutación y series de Neumann	11
2. Grafos métricos y cuánticos	15
2.1. Grafos métricos	15
2.2. Funciones continuas sobre grafos métricos	28
2.3. Funciones medibles e integrables	30
2.4. Diferenciación en grafos métricos	34
3. Operadores diferenciales sobre grafos métricos	37
3.1. Sumas directas externas y espacios de familias de funciones	37
3.2. Operadores diferenciales sobre grafos cuánticos	46
3.3. Propiedades espectrales de un grafo cuántico	52
4. Grafos periódicos	63
4.1. Acciones de grupo y dominios fundamentales	63
4.2. Grafos encajados en \mathbb{R}^n	68
4.3. Descomposición de Bloch del hamiltoniano y estructura <i>band-gap</i> del espectro	70
4.3.1. Teoría de Floquet para la ecuación de Hill	72
4.3.2. Teoría de Floquet para grafos periódicos	73
5. Ecuación de dispersión para un grafo periódico	77
5.1. Problema espectral con potencial simétrico en un intervalo	77
5.2. Ecuación de dispersión para un grafo equilateral y equipotencial	80

5.3. Valores propios de multiplicidad infinita en un grafo equipotencial	86
5.4. Ecuación de dispersión para el caso general	95
5.5. Representaciones analíticas para la ecuación de dispersión	99
6. Conclusiones y comentarios finales	106
Bibliografía	107

Introducción

Las matemáticas son el alfabeto
con el cual Dios ha escrito el
Universo.

Galileo Galilei (1564–1642)

Una de las ramas de la matemática contemporánea que ha tenido un gran auge en las últimas décadas, es la teoría espectral de grafos cuánticos. Un grafo cuántico es, en pocas palabras, una estructura unidimensional en forma de red, compuesta por vértices conectados a través de aristas, la cual se denomina como *grafo métrico*, sobre el que está definido un operador diferencial, generalmente llamado *hamiltoniano*. Los primeros trabajos que podrían clasificarse como pertenecientes a esta área datan de la década de 1930, cuando Linus Pauling (1901-1994) estudió este tipo de sistemas como modelos de electrones libres en algunas moléculas orgánicas. Sin embargo, no es sino hasta el último par de décadas, que la teoría de grafos cuánticos se ha consolidado como un área activa y creciente de la física-matemática. Este crecimiento se debe principalmente, al surgimiento de diversos problemas en física, química e ingeniería, donde se estudian propagaciones de onda a través de sistemas cuasi-unidimensionales, que pueden verse localmente como un grafo. Algunas de las aplicaciones más recientes de los grafos cuánticos han tenido lugar en el campo de la nanotecnología, en el estudio de estructuras de nanotubos de carbono, cristales fotónicos, en la teoría de moléculas conjugadas, en el estudio del caos cuántico, en algunos problemas de sistemas dinámicos e incluso en la teoría de números. Por supuesto, dentro de la misma matemática, la teoría de grafos cuánticos es un área muy rica, pues en ella intervienen diversas ramas de la matemática, como la teoría de grafos, combinatoria, la teoría de operadores, la física-matemática, la teoría de ecuaciones diferenciales (tanto ordinarias como parciales) y la teoría espectral.

Uno de los aspectos fundamentales para entender esta teoría es la definición de *grafo métrico*. Recordemos que un *grafo combinatorio* Γ , consiste de un conjunto de vértices \mathcal{V} junto con una colección de aristas \mathcal{E} , en el que a cada arista se le asocia un par de vértices. En muchas ocasiones, se suele indicar cuales son los vértices de origen y terminal de una arista. Cuando esto sucede, se dice que el grafo Γ es *dirigido*, y se denota al conjunto de aristas por \mathcal{B} . Desde el punto de vista de la matemática discreta, el rol principal

lo juegan los vértices, mientras que las aristas se utilizan únicamente para relacionarlos. En la teoría de grafos cuánticos ocurre lo contrario: la atención se centra en las aristas, pues se consideran como enlaces físicos o “alambres” que conectan los vértices. Es decir, en esencia un grafo métrico se puede considerar como un complejo simplicial unidimensional.

Un **grafo métrico** se define formalmente, como un grafo dirigido Γ con una cantidad contable de vértices, los cuales tienen grado finito, y en la que a cada arista $b \in \mathcal{B}$ se le asocia una *longitud* $\ell(b) > 0$ (véase [6]). Existen diversas maneras de trabajar con grafos métricos, aún cuando casi todas tienen como base la definición anterior. Una de las técnicas más comunes es identificar cada arista $b \in \mathcal{B}$ con el intervalo $[0, \ell(b)]$, y asignarle una coordenada $x_b \in [0, \ell(b)]$. Este enfoque es muy útil en la práctica y es empleado, por ejemplo, en los trabajos de P. Kuchment [6, 20, 21], y en el artículo [5] de D. Barseghyan y A. Khrabustovskiyi. Sin embargo, se puede tratar el concepto de grafo métrico de una forma diferente. Por ejemplo, P. Exner, quien es uno de los pioneros en la investigación de grafos cuánticos moderna, propone en [10], definir a un grafo métrico como una colección de vértices $\mathcal{V} = \{v_j\}_{j \in I}$, junto con una colección de enlaces $\mathcal{L} \subset \mathcal{V}^2$, y una familia de intervalos $I_{\mathcal{L}} = \{[0, \ell_{(i,j)}] \mid (i, j) \in \mathcal{L}\}$, y considerar únicamente la estructura métrica local en cada intervalo $[0, \ell_{(i,j)}]$. Así, cuando se habla de “funciones” definidas sobre el grafo métrico Γ , en realidad se está hablando de familias de funciones $\{f_{(i,j)} : [0, \ell_{(i,j)}] \rightarrow \mathbb{C}\}_{(i,j) \in \mathcal{L}}$ que satisfacen cierta condición de “regularidad” en los vértices.

También existe la posibilidad de construir un espacio métrico a partir de la definición de grafo métrico. La técnica estandar consiste en tomar la familia de intervalos $\mathcal{I} = \{[0, \ell(b)]\}_{b \in \mathcal{B}}$, y considerar su suma ajena $\coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)]$ como base para la construcción de dicho espacio. Por ejemplo, D. Lenz, C. Schubert y P. Stollman en [25], construyen el conjunto $X_{\Gamma} = \mathcal{V} \cup (\coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)])$. Luego, ellos proponen una topología en X_{Γ} , de tal manera que los conjuntos $X_b := (\{b\} \times [0, \ell(b)]) \cup \{o(b), t(b)\}$ sean homeomorfos a los intervalos $[0, \ell(b)]$. Posteriormente prueban que dicha topología es metrizable. El punto fuerte de esta construcción es que no se supone que el grafo Γ sea conexo.

Otro enfoque consiste en suponer que el grafo Γ es conexo, e identificar en el conjunto $\coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)]$ los puntos que correspondan a un mismo vértice. Luego, el conjunto buscado es el cociente que resulta de esta identificación. Esta técnica es empleado por P. Kurasov en [24], y V. Rabinovich en [28], en donde además se propone una forma de construir una métrica en dicho espacio.

Sin embargo, un método que resulta muy efectivo en la práctica y que es ampliamente utilizado, es suponer que el grafo Γ está encajado en \mathbb{R}^n , esto es, que $\mathcal{V}, \mathcal{B} \subset \mathbb{R}^n$, y generalmente se supone que cada arista $b \in \mathcal{B}$ es una curva simple que conecta dos vértices. Entonces se denota $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$ y se puede considerar como un espacio métrico ya sea, ó bien empleando la métrica inducida por \mathbb{R}^n , ó utilizando la longitud de arco. Este punto de vista se utiliza por ejemplo en [22, 23, 3].

Un grafo métrico se convierte en un grafo cuántico cuando es dotado de un **hamiltoniano**, que es un operador diferencial en cada arista. Puesto que en muchos problemas físicos se busca modelar la propagación de una partícula cuántica a través de las aristas del grafo, usualmente se considera el operador menos segunda derivada $-\frac{d^2}{dx^2}$, o de manera más general, el *operador de Schrödinger* $-\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$. De forma análoga al caso

unidimensional, donde se suelen asociar condiciones de frontera a un operador diferencial, para un grafo cuántico las “condiciones de frontera” de un hamiltoniano se establecen en los vértices. Tales operadores se definen sobre un subespacio de $\bigoplus_{b \in \mathcal{B}} L^2[0, \ell(b)]$.

En el artículo [20] de P. Kuchment, se muestra una caracterización de las condiciones de frontera para que el hamiltoniano sea autoadjunto, y se demuestra que si el grafo es compacto, el espectro del hamiltoniano es puramente discreto. Por su parte, P. Exner en su artículo [10], realiza un estudio de la ecuación de Schrödinger con condiciones de tipo delta, sobre un grafo cuyas longitudes de sus aristas están acotadas, y deduce una condición necesaria y suficiente sobre los valores en la frontera de tales soluciones empleando matrices de Jacobi. Otra contribución importante es la de D. Lenz, C. Schubert y P. Stollman, quienes en [25], demuestran una expansión en eigenfunciones generalizadas para operadores de Schrödinger con cierta clase de condiciones de frontera autoadjuntas.

Dentro de la teoría de grafos cuánticos, una subrama que ha tenido importantes aplicaciones en el área de la nanotecnología y el análisis de las estructuras de carbono, es el estudio de los grafos cuánticos periódicos. Los primeros resultados surgen en el artículo [22] de P. Kuchment y O. Post, donde se estudian las propiedades espectrales del grafeno y los nanotubos de carbono, empleando la teoría de grafos cuánticos. En este trabajo se deduce, por ejemplo, que para el operador de Schrödinger con un potencial periódico y simétrico, el espectro del grafeno es puramente esencial, presenta una estructura *band-gap*, y solamente posee eigenvalores de multiplicidad finita cuyo espacio propio es generado por eigenfunciones de soporte compacto. Además, se deduce una ecuación de dispersión para el cálculo del espectro del grafeno. Más tarde, Kuchment en [21] generaliza muchos de estos resultados para grafos cuánticos periódicos. Por su parte, A. Talmage en [31], generaliza el procedimiento empleado por Kuchment para deducir una ecuación de dispersión para el grafeno, demostrando que ésta es válida para cierta clase de grafos periódicos. En [5], D. Barseghyan y A. Khrabustovskyi encuentran ciertas condiciones asintóticas que deben satisfacer los gaps de un hamiltoniano periódico.

En cuanto al cálculo numérico del espectro de un grafo periódico, uno de los trabajos más recientes es el de V. Barrera Figueroa y V. Rabinovich, quienes en [3], emplean el método desarrollado por Talmage para obtener una ecuación de dispersión para un grafo periódico unilateral encajado en \mathbb{R}^n . Además, empleando el método SPPS (Spectral Parameter Power Series), desarrollado por V. V. Kravchenko en [14], y estudiado por V. V. Kravchenko y R. M. Porter en [16], se deducen representaciones analíticas en series de potencias del parámetro espectral para la ecuación de dispersión del grafo, además de emplear tales representaciones para el cálculo numérico del espectro. Posteriormente, V. Barrera, V. Rabinovich y M. M. Rosas en [4], generalizaron los resultados anteriores para el cálculo del espectro de un grafo periódico equilateral, con condiciones de tipo delta.

El presente trabajo de tesis tiene principalmente 2 objetivos.

El primero es realizar un estudio acerca de la teoría de grafos cuánticos, proponiendo una definición para el espacio métrico asociado, y probando algunos de los teoremas básicos acerca del hamiltoniano dado por el operador de Schrödinger con potencial real, y cuyas condiciones de frontera asociadas son las de *Neumann-Kirchhoff*. Se plantea obtener una recopilación de los hechos más relevantes de esta teoría, de tal manera que este texto pueda servir como referencia de la teoría básica para futuros trabajos, o para un curso

introdutorio de la teoría de grafos cuánticos.

Como segundo objetivo, es llevar a cabo un análisis exhaustivo sobre las propiedades que satisface un grafo cuántico periódico, equipado con un operador de Schrödinger periódico, esto con el fin de obtener una ecuación de dispersión para el cálculo del espectro del grafo, así como una representación analítica de la misma, empleando la teoría de operadores de transmutación y las series de Neumann de funciones de Bessel esféricas. Dicha representación para la ecuación de dispersión puede ser empleada, por ejemplo, para el desarrollo de un método numérico para el cálculo del espectro de un grafo periódico.

El material presentado se organiza de la siguiente manera.

El capítulo 1 es una recopilación de algunas herramientas matemáticas básicas para el desarrollo de esta investigación. Se incluyen definiciones y resultados de la teoría de grafos combinatoria, teoría espectral de operadores no acotados en espacios de Hilbert, ecuaciones diferenciales ordinarias y teoría de Sturm-Liouville.

En el capítulo 2 se introduce la definición de grafo métrico, y a partir de ésta se construye un espacio métrico Γ_{met} y se estudian algunas de sus propiedades, tales como la arco conexidad, la completez, y se caracteriza a los grafos compactos como aquellos que sólo poseen un número finito de vértices. Además, se prueba una caracterización para las funciones, tanto continuas como integrables, empleando familias de funciones.

En el capítulo 3 se estudian grafos cuyo hamiltoniano \mathcal{H} está dado por el operador de Schrödinger con potencial real. Se definen los espacios $L^2(\Gamma)$, el espacio de Sobolev $H^2(\Gamma)$, y se introducen las condiciones de Neumann-Kirchhoff (abreviadas N-K). Una vez definido el dominio del hamiltoniano \mathcal{H} , se demuestra que es un operador autoadjunto en $L^2(\Gamma)$, y se obtienen cotas para el espectro $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ en términos del potencial del operador \mathcal{H} . Por último, se demuestra el teorema de Sturm-Liouville para grafos compactos, que establece que el espectro del hamiltoniano en el grafo es discreto.

El capítulo 4 presenta la definición de un grafo periódico. Se demuestra que todo grafo periódico puede ser obtenido a partir de “traslaciones” de un subconjunto Γ_0 denominado dominio fundamental. Además, se incluyen varios resultados acerca del espectro del operador de Schrödinger con un potencial periódico, haciendo énfasis en la representación *band-gap* del espectro, y se analiza el hecho de que es posible reducir el cálculo del mismo, al análisis de ciertos *operadores de Bloch* definidos en el dominio fundamental Γ_0 .

En el capítulo 5 desarrollamos una ecuación de dispersión para un grafo periódico con un potencial simétrico, y por supuesto, se obtiene la correspondiente relación de dispersión para un grafo unilateral y equipotencial. Además, en este último caso, se demuestra que para todo grafo que contiene ciclos, el espectro de Dirchilet $\mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$ del grafo está contenido en $\mathfrak{S}_p(\mathcal{H})$, y corresponde a valores propios de multiplicidad infinita. Por último, se deduce una expresión para la ecuación de dispersión en términos de operadores de transmutación, y partir de ésta, se obtiene una ecuación característica para el espectro del grafo, la cual se representa en términos de series de Neumann de funciones de Bessel.

1

Preliminares

La esencia de las matemáticas
está en su libertad.

Georg Cantor (1845–1918)

En este capítulo presentamos algunos conceptos fundamentales en el estudio de los grafos cuánticos, principalmente relacionados con la teoría de grafos combinatoria, y operadores no acotados sobre espacios de Hilbert.

1.1. Nociones básicas de teoría de grafos

Comenzamos introduciendo algunas nociones básicas sobre teoría de grafos (desde el punto de vista de la matemática discreta).

Definición 1. Un **grafo no dirigido** es un par $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, donde \mathcal{V} y \mathcal{E} son conjuntos, junto con una aplicación

$$\gamma : \mathcal{E} \rightarrow \{\{u, v\} \mid u, v \in \mathcal{V}\}.$$

A los elementos de \mathcal{V} y \mathcal{E} se les llama *vértices* y *aristas* respectivamente, y a la aplicación γ se le denomina *aplicación de incidencia*.

Intuitivamente, la función γ indica los vértices que son incidentes en cada arista. A continuación definimos con formalidad este concepto.

Definición 2. Sean $v \in \mathcal{V}$ y $e \in \mathcal{E}$. Decimos que v es *incidente* en e si $v \in \gamma(e)$, y se definen

$$\mathcal{E}_v := \{e \in \mathcal{E} \mid v \text{ es incidente en } e\},$$

y el *grado* del vértice v como $d_v := \#\mathcal{E}_v$.

Si $e_1, e_2 \in \mathcal{E}$ son tales que $\gamma(e_1) = \gamma(e_2)$, se dice que las aristas son *paralelas*. Por otro lado, si $\gamma(e_1)$ consta de un solo vértice, se dice que e_1 es un *lazo*. Un grafo que contiene aristas paralelos o lazos se llama *multigrafo*.

Ahora intruducimos el concepto de grafo dirigido.

Definición 3. Un **grafo dirigido** es un par $\Gamma_d = (\mathcal{V}, \mathcal{B})$, donde \mathcal{V} y \mathcal{B} son conjuntos, junto con un par de aplicaciones

$$o, t : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{V}.$$

Los elementos de \mathcal{B} se denominan *aristas dirigidas* y las imágenes $o(b)$ y $t(b)$ representan los vértices de origen y terminal de la arista dirigida b . Cabe recalcar que dado un grafo dirigido Γ_d , se le puede asociar un grafo no dirigido Γ_{nd} de la siguiente forma: $\Gamma_{nd} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}_{nd})$, donde el conjunto de vértices \mathcal{V} es el mismo que en Γ_d , el conjunto de aristas no dirigidas es $\mathcal{E}_{nd} = \mathcal{B}$, y la aplicación de incidencia está dada por

$$\gamma(b) = \{o(b), t(b)\}, \quad \text{para } b \in \mathcal{E}_{nd}.$$

Definición 4. Sea $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ un grafo no dirigido. Dos vértices $u, v \in \mathcal{E}$ se dicen **adyacentes** si existe $e \in \mathcal{E}$ tal que $\gamma(e) = \{u, v\}$. En este caso, se denota $u \sim v$.

El concepto puede definirse para grafos dirigidos empleando el grafo no dirigido asociado. Para un grafo dirigido también se suele usar la notación

$$\overrightarrow{\mathcal{B}}_v := \{b \in \mathcal{B}_v \mid v = o(b)\} \quad (\text{aristas de salida})$$

$$\overleftarrow{\mathcal{B}}_v := \{b \in \mathcal{B}_v \mid v = t(b)\} \quad (\text{aristas de entrada})$$

para $v \in \mathcal{V}$, y entonces se tiene $\mathcal{B}_v = \overrightarrow{\mathcal{B}}_v \cup \overleftarrow{\mathcal{B}}_v$.

Hipótesis 1. Todos los grafos en consideración (dirigidos o no dirigidos) son contables (es decir, que el conjunto de vértices es a lo más numerable).

Definición 5. Sea $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ un grafo no dirigido, y $u, v \in \mathcal{V}$. Un **camino** de u a v , es una sucesión finita de aristas e_1, e_2, \dots, e_n , junto con una sucesión finita de vértices v_0, v_1, \dots, v_n tales que

- (i) $v_0 = u$ y $v_n = v$.
- (ii) $\gamma(e_i) = \{v_i, v_{i-1}\}$, $i = \overline{1, n}$.

En este caso, se dice que u está conectado con v .

Decimos que el grafo Γ es *conexo* si cualesquiera dos de sus vértices están conectados.

Si $\Gamma_d = (\mathcal{V}, \mathcal{B})$ es un grafo dirigido, diremos que Γ_d es conexo si su grafo no dirigido asociado es conexo.

Notemos que la relación

$$uRv \Leftrightarrow u \text{ está conectado con } v.$$

es de equivalencia. Así, Γ es conexo si la única clase de equivalencia de la relación es \mathcal{V} .

Por su puesto, puede haber diferentes caminos que conecten a dos vértices dados, pero en algunos casos es posible que exista un camino “simple” entre ellos.

Definición 6. Sean $v, w \in \mathcal{V}$, y suponga que $v_0, v_1, \dots, v_n \in \mathcal{V}$ y $e_1, e_2, \dots, e_n \in \mathcal{E}$ forman un camino de v a w . Diremos que tal camino es **simple**, si los vértices v_1, \dots, v_n son distintos 2 a 2.

Es decir, un camino es simple si sus vértices (con la posible excepción del primero y el último) no se repiten. Un resultado importante de la teoría de grafos, es que de cualquier camino dado, siempre se puede extraer un camino simple.

Teorema 1. [2, cap. 1] Sea $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ un grafo no dirigido, y $v, w \in \mathcal{V}$. Supongase que $v_0, v_1, \dots, v_n \in \mathcal{V}$ y $e_1, e_2, \dots, e_n \in \mathcal{E}$ forman un camino de v a w . Entonces existe un subcamino con vértices v_{n_0}, \dots, v_{n_k} y aristas e_{n_1}, \dots, e_{n_k} , que es simple.

Por supuesto, para un grafo dirigido $\Gamma_d = (\mathcal{V}, \mathcal{B})$, un camino $v_0, v_1, \dots, v_n \in \mathcal{V}$, $e_1, e_2, \dots, e_n \in \mathcal{B}$ es simple, si cumple con dicha propiedad en el respectivo grafo no dirigido asociado Γ_{nd} . Así, el teorema 1 es válido también para grafos dirigidos.

Pasamos a definir el concepto de *ciclo* en un grafo, el cual será de gran importancia en resultados posteriores.

Definición 7. Un **ciclo** en un grafo no dirigido $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, es un camino $v_0, \dots, v_n \in \mathcal{V}$, $e_1, \dots, e_n \in \mathcal{E}$ tal que $v_0 = v_n$. Decimos que el ciclo es **simple**, si es un camino simple.

Es decir, un ciclo es un camino cerrado, y es simple si ninguno de los vértices (salvo los extremos) se repite. Es importante notar que para cada vértice v_i en el ciclo, solamente 2 de sus aristas incidentes pertenecen al ciclo, en concreto, e_i y e_{i+1} .

De nueva cuenta, para un grafo dirigido Γ_d , diremos que v_0, \dots, v_n y e_1, \dots, e_n forman un ciclo (ciclo simple) en Γ_d , si lo forman en el correspondiente grafo no dirigido Γ_{nd} .

Como corolario del teorema 1 tenemos el siguiente resultado.

Corolario 1. En un grafo Γ (dirigido o no dirigido), todo ciclo posee un subciclo simple.

Para terminar con esta sección de preliminares de teoría de grafos, introducimos el concepto de árbol.

Definición 8. Un grafo Γ , dirigido ó no dirigido, se llama **árbol**, si no posee ciclos.

1.2. Operadores no acotados

Pasamos ahora a repasar algunos resultados referentes al análisis funcional y la teoría de operadores no acotados. Durante esta sección, \mathcal{H} denotará un espacio de Hilbert complejo. Recordemos que un **operador lineal** en \mathcal{H} , es una función $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ tal que

(i) $\mathcal{D}(T)$ es un subespacio de \mathcal{H} , llamado **dominio** de T .

(ii) T es una transformación lineal:

$$\forall x, y \in \mathcal{D}(T) \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C} \quad T(\alpha x + \beta y) = \alpha T x + \beta T y.$$

La imagen o *rango* del operador T se denota por $\mathcal{R}(T)$, y es también un subespacio de \mathcal{H} .

En esta tesis el término *operador* siempre se empleará para referirse a operadores lineales, pues serán los únicos que se considerarán en este trabajo.

Definición 9. Sea $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador. Decimos que T es *densamente definido* si su dominio $\mathcal{D}(T)$ es denso en \mathcal{H} .

Nota. Si un operador T densamente definido es *acotado* en su dominio, puede extenderse a un operador acotado $\tilde{T} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ preservando su norma. Por ello, siempre que se hable de operadores acotados, se entenderá que están definidos en todo \mathcal{H} . Denotaremos por $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ al álgebra de operadores acotados que actúan de \mathcal{H} en sí mismo, y por $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ a la sub-álgebra de operadores compactos.

Definición 10. Sea $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido. El **operador adjunto** de T , es el operador $T^* : \mathcal{D}(T^*) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ cuyo dominio está dado por:

$$\mathcal{D}(T^*) := \{x' \in \mathcal{H} \mid \exists y' \in \mathcal{H} : \forall x \in \mathcal{D}(T) \langle Tx, x' \rangle = \langle x, y' \rangle\},$$

y definido por: $T^*x' := y'$.

Cabe recalcar que T^* es un operador bien definido si y sólo si, el operador T es densamente definido.

Definición 11. Sean $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ y $S : \mathcal{D}(S) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ operadores. Decimos que S es una *extensión* de T si

(i) $\mathcal{D}(T) \subset \mathcal{D}(S)$.

(ii) $S|_{\mathcal{D}(T)} = T$.

En este caso, denotamos $T \subset S$.

Proposición 1. [18, cap. 10] Sean $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ y $S : \mathcal{D}(S) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ operadores densamente definidos. Se tiene que:

(i) $S \subset T \Rightarrow T^* \subset S^*$.

(ii) $T^* + S^* \subset (T + S)^*$.

(iii) Si la composición ST es densamente definida, entonces $T^*S^* \subset (ST)^*$. Más aún, si $S \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, entonces $T^*S^* = (ST)^*$.

Definición 12. Un operador $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ (no necesariamente densamente definido) es **simétrico** si

$$\forall x, y \in \mathcal{D}(T) \quad \langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle.$$

Proposición 2. [18, cap. 10] Sea $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido. Los siguientes enunciados son equivalentes:

(a) T es simétrico.

(b) $T \subset T^*$.

(c) $\forall x \in \mathcal{D}(T) \quad \langle Tx, x \rangle \in \mathbb{R}$.

Definición 13. Un operador $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ densamente definido es **autoadjunto** si $T = T^*$.

Proposición 3. [18, cap. 10] Un operador $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ simétrico, densamente definido, es autoadjunto si y sólo si $\mathcal{D}(T^*) \subset \mathcal{D}(T)$.

Definición 14. Sea $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador. Se dice que T es **cerrado** si y sólo si

$$\forall \{x_n\}_{n=0}^{\infty} \subset \mathcal{D}(T) \quad x_n \rightarrow x \text{ y } Tx_n \rightarrow y \Rightarrow x \in \mathcal{D}(T) \text{ y } y = Tx.$$

Proposición 4. [18, cap.10] Sea $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido.

- (i) T^* es cerrado.
- (ii) Si T es autoadjunto, entonces T es cerrado.
- (iii) Si $\mathcal{D}(T^*)$ es denso, entonces $T \subset T^{**}$.

Definición 15. Sea $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador. Un número $\lambda \in \mathbb{C}$ se dice que es un **valor regular** de T , si el operador $T - \lambda \mathbf{1} : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ satisface las siguientes condiciones:

- (i) $T - \lambda \mathbf{1}$ es inyectivo.
- (ii) El operador inverso $(T - \lambda \mathbf{1})^{-1} : \mathcal{R}(T - \lambda \mathbf{1}) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ es densamente definido y acotado.

La colección de todos los valores regulares de T se denota por $\rho(T)$ y se denomina el **conjunto resolvente** de T . El *espectro* de T es el conjunto $\mathfrak{S}(T) := \mathbb{C} \setminus \rho(T)$.

El espectro de un operador se suele dividir en 3 subconjuntos, los cuales son ajenos entre sí.

- (i) El **espectro puntual**: $\mathfrak{S}_p(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \exists x \in \mathcal{D}(T) : Tx = \lambda x\}$. Los elementos de $\mathfrak{S}_p(T)$ se llaman **valores propios** (o *eigenvalores*) del operador T , y a los vectores $x \in \mathcal{D}(T)$ que cumplen $Tx = \lambda x$ se les llama **vectores propios** (o *eigenvectores*) asociados al valor propio λ . El *espacio propio* generado por λ es el subespacio $E_\lambda(T) := \ker(T - \lambda \mathbf{1})$, mientras que la **multiplicidad** de λ es el número $m_T(\lambda) := \dim \ker(T - \lambda \mathbf{1})$. Si $m_T(\lambda) = 1$, se dice que λ es un **valor propio simple**.
- (ii) **Espectro continuo**: Denotado $\mathfrak{S}_c(T)$, consiste de todos los valores $\lambda \in \mathbb{C}$ tales que el operador $(T - \lambda \mathbf{1})^{-1} : \mathcal{R}(T - \lambda \mathbf{1}) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ existe y es densamente definido, pero no es acotado.
- (iii) **Espectro residual**: Denotado $\mathfrak{S}_r(T)$, son todos los valores $\lambda \in \mathbb{C}$ para los cuales el operador $(T - \lambda \mathbf{1})^{-1} : \mathcal{R}(T - \lambda \mathbf{1}) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ existe, pudiendo ser acotado o no, pero no es densamente definido.

De este modo, $\mathfrak{S}(T) = \mathfrak{S}_p(T) \cup \mathfrak{S}_c(T) \cup \mathfrak{S}_r(T)$ y esta union es disjunta.

Además de la clasificación anterior, es posible considerar otra subclasificación del espectro, basada en la multiplicidad de los valores propios.

Definición 16. Sea $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido. Se define:

(i) El **espectro discreto** de T como:

$$\mathfrak{S}_d(T) := \{\lambda \in \mathfrak{S}_p(T) \mid \lambda \text{ es punto aislado de } \mathfrak{S}(T) \text{ y } m_T(\lambda) < \infty\}$$

(ii) El **espectro esencial** de T como $\mathfrak{S}_{\text{ess}}(T) := \mathfrak{S}(T) \setminus \mathfrak{S}_d(T)$ ¹.

Observación 1. De la definición anterior se tiene que $\mathfrak{S}_d(T) \subset \mathfrak{S}_p(T)$, pero en general esta inclusión puede ser propia. De igual forma puede ocurrir que $\mathfrak{S}_{\text{ess}}(T) \cap \mathfrak{S}_p(T) \neq \emptyset$ (¡por lo cual no se debe confundir el espectro esencial con el continuo!).

Para ejemplificar esto, consideremos el operador $D : C^1[0, 1] \subset L^2[0, 1] \rightarrow L^2[0, 1]$ dado por la primera derivada: $Du = u'$, para $u \in C^1[0, 1]$. Para cualquier $\lambda \in \mathbb{C}$, la ecuación $Du = u' = \lambda u$ siempre tiene una solución, digamos $u(x) = e^{\lambda x} \in C^1[0, 1]$. Luego, $\mathfrak{S}_p(D) = \mathbb{C}$ con lo cual $\mathfrak{S}(D) = \mathfrak{S}_p(D)$. Sin embargo $\mathfrak{S}_d(D) = \emptyset$ pues los valores propios no son aislados. Entonces $\mathfrak{S}_p(D) = \mathfrak{S}_{\text{ess}}(D)$.

De manera análoga a las matrices simétricas, cuyos valores propios son reales, los operadores autoadjuntos satisfacen esta propiedad con su espectro.

Teorema 2. [30, pág. 45] Sea \mathcal{H} espacio de Hilbert complejo, y $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido y autoadjunto. Entonces $\mathfrak{S}(T) \subset \mathbb{R}$ y es un subconjunto cerrado. Más aún, $\mathfrak{S}_r(T) = \emptyset$, esto es, $\mathfrak{S}(T) = \mathfrak{S}_p(T) \cup \mathfrak{S}_c(T)$.

Teorema 3. [30, pág. 43] Sea \mathcal{H} espacio de Hilbert complejo, y $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido y autoadjunto. Entonces $\lambda \in \rho(T)$ si y sólo si, existe $c > 0$ tal que

$$\forall x \in \mathcal{D}(T) \quad \|(T - \lambda \mathbf{1})x\| \geq c\|x\|.$$

Siguiendo la notación estándar, denotamos $R_T(\lambda) = (T - \lambda \mathbf{1})^{-1}$ para $\lambda \in \rho(T)$, y llamamos a tal operador el *operador resolvente* de T en λ .

Teorema 4. (Identidad de Hilbert, [30, pág. 31]) Sea $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador cerrado. Entonces para cualesquiera $\lambda, \mu \in \rho(T)$ se cumple:

$$R_T(\lambda) - R_T(\mu) = (\lambda - \mu)R_T(\lambda)R_T(\mu).$$

Finalmente, enunciamos algunas propiedades relacionadas con el espectro de un operador compacto y autoadjunto en un espacio de Hilbert.

Teorema 5. [7, cap. 6] Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert de dimensión infinita, y $T \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$.

(i) El espectro $\mathfrak{S}(T)$ es a lo más numerable, $0 \in \mathfrak{S}(T)$ y $\mathfrak{S} \setminus \{0\} = \mathfrak{S}_p(T) \setminus \{0\}$. Si $\mathfrak{S}(T)$ es infinito, entonces 0 es el único punto de acumulación.

(ii) $\forall \lambda \in \mathfrak{S}_p(T) \setminus \{0\} \quad m_T(\lambda) < \infty$.

(iii) Si \mathcal{H} es separable y T es autoadjunto, entonces existe una base ortonormal de \mathcal{H} formada por vectores propios de T .

¹Existe otra caracterización del espectro esencial, como los valores λ para los cuales $T - \lambda \mathbf{1}$ no es un operador de Fredholm en \mathcal{H} , sin embargo en este trabajo no se ocupará tal caracterización

1.3. Operadores de transmutación y series de Neumann

Para finalizar este capítulo de preliminares, enunciaremos algunos resultados relacionados con la teoría de Sturm-Liouville. Recordemos que el **problema de Sturm-Liouville** en un intervalo $[a, b]$, consiste en encontrar todos los valores $\lambda \in \mathbb{C}$ para los cuales el problema de valores en la frontera:

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} y \right) + q(x)y &= \lambda r(x)y, & a < x < b \\ \alpha_1 y(a) + \beta_1 y'(a) &= 0 \\ \alpha_2 y(b) + \beta_2 y'(b) &= 0 \end{aligned} \tag{1.1}$$

donde $p, p', q, r \in C[a, b]$ son funciones dadas y $|\alpha_i| + |\beta_i| > 0$, $i = 1, 2$, posee una solución no trivial. Los valores λ para los cuales el problema (1.1) tiene solución se llaman *valores propios del problema*. Uno de los resultados clásicos es el *teorema de Sturm-Liouville*, el cual establece que, bajo ciertas condiciones en los coeficientes de la ecuación, el problema de Sturm-Liouville tiene solución.

Teorema 6. [1, cap. 2][**Sturm-Liouville**] Suponga que $p, p', q, r \in C[a, b]$ son funciones de valor real y $p(x), r(x) > 0$ para cada $x \in [a, b]$. Entonces el problema de Sturm-Liouville (1.1) tiene una sucesión de valores propios:

$$\lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_n < \dots$$

tales que $\lambda_n \rightarrow \infty, n \rightarrow \infty$. Más aún, los valores propios son simples.

Por supuesto, existen otros resultados para el caso en que los coeficientes son funciones de valor complejo y menos “regulares” (véase por ejemplo [26, 12]). Uno de los resultados más importantes relacionado con el cálculo de los valores y funciones propias del problema de Sturm-Liouville es la representación analítica de las soluciones de la ecuación:

$$-\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} y \right) + q(x)y = \lambda r(x)y, \quad a < x < b$$

la cual se basa en el hecho de que cualquier problema asociado a esta ecuación, con condiciones de frontera holomorfas en λ , tendrá soluciones holomorfas en λ ([12, cap. 1]). Una de tales soluciones se basa en la expansión en serie de Taylor con respecto al parámetro espectral y recibe el nombre de representación en series de potencias del parámetro espectral, o simplemente el **método SPPS**. Para nuestros propósitos es suficiente enunciar el resultado correspondiente a la **ecuación de Schrödinger**:

$$Lu := -u'' + q(x)u = \lambda u.$$

Teorema 7. [14] Sea $q \in C[a, b]$ y suponga que $f \in C^2(a, b) \cap C^1[a, b]$ es una solución de $Lf = 0$ que no se desvanece en todo el intervalo $[a, b]$. Entonces la solución general de la ecuación de Schrödinger $Lu = \lambda u$ en (a, b) tiene la forma

$$u = c_1 u_1 + c_2 u_2$$

donde $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ y

$$u_0(\lambda, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k \varphi_{2k}(x)}{(2k)!}, \quad u_1(\lambda, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k \varphi_{2k+1}(x)}{(2k+1)!}.$$

Las funciones $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$ se denominan **potencias formales** y se definen de la siguiente manera:

$$\varphi_k(x) := \begin{cases} f(x)\tilde{X}^{(k)}(x), & k \text{ par}, \\ f(x)X^{(k)}(x), & k \text{ impar}, \end{cases}$$

y las funciones $\{X^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$, $\{\tilde{X}^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ están dadas por las siguientes integrales recursivas: $\tilde{X}^{(0)} \equiv X^{(0)} \equiv 1$, y

$$\tilde{X}^{(k)}(x) := \begin{cases} k \int_{x_0}^x \tilde{X}^{(k-1)}(s) f^2(s) ds, & k \text{ impar}, \\ k \int_{x_0}^x \frac{\tilde{X}^{(k-1)}(s)}{f^2(s)} ds, & k \text{ par} \end{cases}, \quad \forall k \geq 1$$

y

$$X^{(k)}(x) := \begin{cases} k \int_{x_0}^x X^{(k-1)}(s) f^2(s) ds, & k \text{ par}, \\ k \int_{x_0}^x \frac{X^{(k-1)}(s)}{f^2(s)} ds, & k \text{ impar} \end{cases}, \quad \forall k \geq 1$$

con $x_0 \in [a, b]$ un punto dado.

Dependiendo del punto x_0 elegido, se dice que las potencias formales $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$ están centradas en x_0 .

La importancia de la representación SPSS es que permite reducir el cálculo de los valores propios del problema de Sturm-Liouville, al de encontrar las raíces de una ecuación de dispersión $\Phi(\lambda) = 0$, donde $\Phi(\lambda)$ es una función entera, además de proveer de un método numérico para el cálculo aproximado de las funciones propias (véase [16]).

Existen otras representaciones de las soluciones de la ecuación de Schrödinger. Una de las más importantes es mediante el uso de los *operadores de transmutación*.

Definición 17. Sean E un espacio lineal topológico, $E_1 \subset E$ un subespacio y $A, B : E_1 \rightarrow E$ operadores lineales. Un **operador de transmutación** para el par de operadores A, B , es un operador $T : E \rightarrow E$ biyectivo que satisface las siguientes condiciones:

- (i) T y T^{-1} son continuos en E .
- (ii) E_1 es invariante bajo T .
- (iii) La siguiente igualdad operacional es válida en E_1 :

$$AT = TB \text{ o equivalentemente } A = TBT^{-1}.$$

El caso de interés es cuando $E = C[-b, b]$ con la topología de la norma uniforme, $E_1 = C^2[-b, b]$ y $A = -\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$, $B = -\frac{d^2}{dx^2}$.

Teorema 8. [26] Sea $q \in C[-b, b]$. Entonces un operador de transmutación para $A = -\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$ y $B = -\frac{d^2}{dx^2}$ está dado por el siguiente operador de Volterra:

$$T_h u(x) = u(x) + \int_{-x}^x K_h(x, t) u(t) dt, \quad u \in C[-b, b].$$

donde el núcleo $K_h(x, t) = H_h\left(\frac{x+t}{2}, \frac{x-t}{2}\right)$, $|t| \leq |x| \leq b$ y H_h es solución al problema de Goursat

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 H_h(u, v)}{\partial u \partial v} &= q(u+v) H_h(u, v) \\ H_h(u, 0) &= \frac{h}{2} + \frac{1}{2} \int_0^u q(s) ds \\ H_h(0, v) &= \frac{h}{2} \end{aligned}$$

con $h \in \mathbb{C}$.

Se puede comprobar que el núcleo K_h satisface las siguientes condiciones en las características:

$$K_h(x, x) = \frac{h}{2} + \frac{1}{2} \int_0^x q(s) ds, \quad K_h(x, -x) = \frac{h}{2}.$$

Más aún, si $q \in C^1[-b, b]$ entonces el núcleo K_h es solución de la ecuación de Klein-Gordon

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial t^2} - q(x) \right) K_h(x, t) = 0.$$

Además, si $q \in C^k[-b, b]$, entonces $K_h \in C^{k+1}(R)$, donde $R = \{(x, t) \in \mathbb{R}^2 \mid |t| \leq |x| \leq b\}$ (para la demostración de estos hechos, véase [26]).

Un caso muy importante es cuando consideramos una solución f de $-f'' + q(x)f = 0$, que no se desvanece en $[-b, b]$ y normalizada de tal forma que $f(0) = 1$. Tomando $h = f'(0)$, denotamos $K_f(x, t) = K_h(x, t)$ y $T_f = T_h$, y si $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^\infty$ son las potencias formales asociadas a f y centradas en $x_0 = 0$, entonces se tiene la siguiente propiedad:

$$\forall k \in \mathbb{N}_0 \quad T_f[x^k] = \varphi_k.$$

La demostración de este hecho puede observarse en [8]. Otra de las propiedades del operador de transmutación es que transforma las soluciones de la ecuación $-v'' = \omega^2 v$ en soluciones de la ecuación $u'' - q(x)u + \omega^2 v = 0$.

Teorema 9. [8] Sea $q \in C[-b, b]$ y $h \in \mathbb{C}$. Entonces las soluciones $\mathbf{c}_h(\omega, x)$ y $\mathbf{s}(\omega, x)$ de la ecuación

$$-u'' + q(x)u = \omega^2 u, \quad -b \leq x \leq b, \quad \omega \in \mathbb{C}$$

que satisfacen las condiciones iniciales

$$\mathbf{c}_h(\omega, 0) = 1, \quad \mathbf{c}'_h(\omega, 0) = h \quad \text{y} \quad \mathbf{s}(\omega, 0) = 0, \quad \mathbf{s}'(\omega, 0) = 1$$

están dadas por

$$\mathbf{c}_h(\omega, x) = T_h[\cos(\omega x)], \quad \mathbf{s}(x, \omega) = T_h\left[\frac{\sin(\omega x)}{\omega}\right].$$

De este modo se ha obtenido otra forma de representar a las soluciones de la ecuación de Schrödinger, por medio del uso de los operadores de transmutación.

Para cada $x \in [-b, b]$ fijo, $K_f(x, \cdot) \in C^1[-x, x] \subset L^2[-x, x]$, por lo cual podemos expandir K_f en términos de una base de $L^2[-x, x]$. Recordemos que en $L^2[-1, 1]$, los *polinomios de Legendre* forman una base ortogonal. Denotamos a tales polinomios por $\{P_n\}_{n=0}^{\infty}$ y $P_n(x) = \sum_{k=0}^n l_{k,n} x^k$, entonces se tiene el siguiente teorema de representación para el núcleo K_f :

Teorema 10. [15] *El núcleo de transmutación $K_f(x, t)$ admite la siguiente representación como una serie de Fourier-Legendre*

$$K_f(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta_n(x)}{x} P_n\left(\frac{t}{x}\right)$$

donde

$$\beta_n(x) := \frac{2n+1}{2} \left(\sum_{k=0}^n \frac{l_{k,n} \varphi_k(x)}{x} - 1 \right),$$

además, para cada $x \in (0, b]$ la serie converge uniformemente en $t \in [-x, x]$.

En [15] también se demuestra que para conocer los valores del núcleo $K_f(x, t)$ para $x > 0$, basta sólo con conocer los valores del potencial q en $[0, b]$, por ello estas representaciones son válidas para calcular las soluciones de la ecuación de Schrödinger en el segmento $(0, b)$. Una consecuencia muy importante de la expansión en serie de Fourier-Legendre del núcleo K_f , es la representación de las soluciones \mathbf{c}_h y \mathbf{s} como *series de Neumann* de funciones de Bessel.

Teorema 11. [15] *Las soluciones \mathbf{c}_h y \mathbf{s} de la ecuación de Schrödinger que satisfacen las condiciones del teorema 9 admiten las siguientes representaciones:*

$$\mathbf{c}_h(\omega, x) = \cos(\omega x) + 2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta_{2n}(x) j_{2n}(\omega x)$$

$$\mathbf{s}(\omega, x) = \frac{\sin(\omega x)}{\omega} + \frac{2}{\omega} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta_{2n+1}(x) j_{2n+1}(\omega x),$$

donde $\{j_n(\omega x)\}_{n=0}^{\infty}$ son las funciones de Bessel esféricas. Ambas series convergen uniformemente con respecto a x en todo $[0, b]$, y uniformemente en ω en cualquier compacto de \mathbb{C} .

Las expresiones anteriores son de gran utilidad para el cálculo de los valores propios para problemas de Sturm-Liouville de la ecuación de Schrödinger.

Grafos métricos y cuánticos

Las matemáticas son el arte de
dar el mismo nombre a
diferentes cosas

Henri Poincaré (1854–1912)

Dentro de la teoría de las ecuaciones diferenciales se analizan funciones con diversos dominios: desde la recta real, hasta alguna región de \mathbb{R}^n . Sin embargo, existe otro tipo de funciones consideradas sobre dominios “poco habituales”. Nos referimos a aquellas definidas sobre grafos, los cuales han sido dotados de una estructura de espacio métrico. Tales grafos reciben, como es natural, el nombre de *grafos métricos*.

Hasta el momento hemos considerado a los grafos desde el punto de vista de la matemática discreta y la combinatoria. En este enfoque, las aristas suelen ser vistas únicamente como relaciones entre los vértices, mas que como enlaces geométricos o físicos. Desde esta perspectiva llamaremos a tales grafos *discretos o combinatorios*.

El punto de vista de interés en esta tesis es el contrario: considerar a las aristas como enlaces geométricos, como “alambres” que conectan a los vértices, y analizar el grafo, no como un par de vértices y aristas, sino como un conjunto formado por segmentos (las aristas) conectados por medio de los vértices.

Con este punto de vista, es necesario construir un espacio métrico a partir del concepto de grafo combinatorio, como mostraremos en este capítulo.

2.1. Grafos métricos

Comenzamos definiendo nuestro objeto principal de estudio: los grafos métricos.

Definición 18. Un **grafo métrico** consta de lo siguiente:

- (i) Un grafo dirigido $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{B})$, equipado con su par de funciones origen y terminal $o, t : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{V}$.

- (ii) Una aplicación $\ell : \mathcal{B} \rightarrow [0, +\infty)$, llamada **función de longitud**. Para cada arista dirigido $b \in \mathcal{B}$, el número $\ell(b)$ se denomina *longitud de b* .

A partir de la función de longitud, asociamos a nuestro grafo métrico una colección de intervalos indexados $\mathcal{I}_\Gamma := \{[0, \ell(b)]\}_{b \in \mathcal{B}}$.

Cabe recalcar que el nombre de “grafo métrico” es de momento, una forma de llamar a la colección de datos presentados en la definición anterior. Sin embargo, empleando estos elementos, definiremos un espacio métrico asociado a nuestro grafo.

Con el fin de realizar esta construcción, requerimos que el grafo Γ cumpla con ciertas propiedades.

Hipótesis 2. Para cualquier grafo métrico en consideración, se supondrá que:

- (i) El grafo Γ es conexo.
- (ii) Para cada $v \in \mathcal{V}$, $0 < d_v < +\infty$.
- (iii) No existen lazos ni tampoco aristas dobles, i.e. si $b \in \mathcal{B}$, no puede ocurrir $o(b) = t(b)$, y no existe $\bar{b} \in \mathcal{B}$ tal que $o(b) = t(\bar{b})$ y $t(b) = o(\bar{b})$.

El término *métrico* proviene del hecho de que con los elementos dados en la definición 1, se puede asociar al grafo Γ un espacio métrico. Para esta construcción requerimos de la siguiente definición:

Definición 19. Sea $\{X_\alpha\}_{\alpha \in \Lambda}$ una colección indexada de conjuntos. Definimos la *suma ajena* (también llamada *coproducto*) de la colección $\{X_\alpha\}_{\alpha \in \Lambda}$, como:

$$\coprod_{\alpha \in \Lambda} X_\alpha := \bigcup_{\alpha \in \Lambda} \{\alpha\} \times X_\alpha.$$

Ahora consideremos la suma ajena de los intervalos asociados al grafo métrico, $\coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)]$. Intuitivamente, esto nos permite considerar a los intervalos como objetos diferentes dos a dos, ya que por ejemplo, puede ocurrir que dos intervalos etiquetados por diferentes aristas tengan la misma longitud. Notemos que el coproducto consiste de pares ordenados de la forma (b, x) , con $b \in \mathcal{B}$ y $x \in [0, \ell(b)]$. El siguiente paso de nuestra construcción consiste en “pegar” los intervalos por los vertices. Para esto será de utilidad la siguiente función auxiliar:

$$\Pi : \coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)] \rightarrow \mathcal{V} \cup \mathcal{B}, \quad (2.1)$$

la cual está dada por

$$\Pi(b, x) := \begin{cases} o(b), & \text{si } x = 0, \\ t(b), & \text{si } x = \ell(b), \\ b, & \text{si } x \in (0, \ell(b)), \end{cases}, \quad \forall (b, x) \in \coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)].$$

Definimos ahora la siguiente relación de equivalencia en $\coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)]$: $(b, x) \sim (c, y)$ si y sólo si, $\Pi(b, x), \Pi(c, y) \in \mathcal{V}$ y $\Pi(b, x) = \Pi(c, y)$, ó bien, en caso de que

$\Pi(b, x), \Pi(c, y) \in \mathcal{B}$, si $(b, x) = (c, y)$.

Notamos que en efecto ésta es una relación de equivalencia, y denotamos la clase de equivalencia del par (b, x) por $(b, x)^\sim$. Intuitivamente, lo que la relación de equivalencia hace es “pegar” los extremos de los intervalos que representan al mismo vertice. Así, el conjunto que formar nuestro espacio métrico será el conjunto cociente de la relación:

$$\Gamma_{met} := \left(\coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)] \right) / \sim . \quad (2.2)$$

Se observa que por construcción de la relación \sim , $\Pi(b, x) = \Pi(c, y)$ si y sólo si $(b, x) \sim (c, y)$, con lo cual podemos definir $\Pi((b, x)^\sim)$ como $\Pi(b, x)$, donde (b, x) es algún representante de clase.

Ahora procedemos a definir una topología en nuestro conjunto Γ_{met} . Para esto, primero definimos una topología en el coproducto $\coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)]$ de la siguiente manera: consideremos una arista $b \in \mathcal{B}$; definimos la *inyección canónica* en $\{b\} \times [0, \ell(b)]$ como:

$$\begin{aligned} \psi_b : [0, \ell(b)] &\rightarrow \{b\} \times [0, \ell(b)] \\ x &\mapsto (b, x) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Claramente ψ_b es una biyección. Se define entonces

$$\tau_b := \left\{ U \subset \{b\} \times [0, \ell(b)] \mid \psi_b^{-1}(U) \in \tau_{[0, \ell(b)]} \right\},$$

donde $\tau_{[0, \ell(b)]}$ es la topología usual en el intervalo $[0, \ell(b)]$. Es fácil ver que τ_b es una topología (de hecho, es la *topología final* de $\{b\} \times [0, \ell(b)]$ con respecto a la inyección canónica ψ_b , véase [29]).

Ahora se extiende este procedimiento a todo el coproducto de la siguiente manera:

$$\tau_{\sqcup} := \left\{ U \subset \coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)] \mid \forall b \in \mathcal{B} \ U \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)]) \in \tau_b \right\}.$$

Proposición 5. *La colección τ_{\sqcup} es una topología en el coproducto $\coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)]$*

Demostración. Veamos que τ_{\sqcup} satisface las propiedades de una topología:

1. $\coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)], \emptyset \in \tau_{\sqcup}$: En efecto, puesto que para cada $b \in \mathcal{B}$

$$\coprod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)] \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)]) = \{b\} \times [0, \ell(b)] \in \tau_b \text{ y } \emptyset \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)]) = \emptyset \in \tau_b.$$

2. Si $A, B \in \tau_{\sqcup}$, entonces para cualquier $b \in \mathcal{B}$ se tiene $U \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)]), V \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)]) \in \tau_b$. Luego, como τ_b es topología tenemos que

$$(U \cap V) \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)]) = (U \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)])) \cap (V \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)])) \in \tau_b$$

Como $b \in \mathcal{B}$ es arbitrario, se sigue que $U \cap V \in \tau_{\sqcup}$.

3. Sea $\{U_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{A}} \subset \tau_\sqcup$. Tomando $b \in \mathcal{B}$, se tiene que para cada $\alpha \in \mathcal{A}$, $U_\alpha \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)]) \in \tau_b$. Como τ_b es topología, tenemos:

$$\left(\bigcup_{\alpha \in \mathcal{A}} U_\alpha \right) \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)]) = \bigcup_{\alpha \in \mathcal{A}} (U_\alpha \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)])) \in \tau_b.$$

Dado que $b \in \mathcal{B}$ era arbitrario, concluimos que $\bigcup_{\alpha \in \mathcal{A}} U_\alpha \in \tau_\sqcup$.

Hemos probado entonces que τ_\sqcup es una topología en $\amalg_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)]$. **Q.E.D.**

Finalmente dotamos a $\Gamma_{met} := (\amalg_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)]) / \sim$ con la topología cociente, es decir, la topología mas fuerte que hace continua a la proyección:

$$\begin{aligned} p : \amalg_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)] &\rightarrow \Gamma_{met} \\ (b, x) &\mapsto (b, x)^\sim \end{aligned}$$

Explícitamente, la topología cociente (que denotaremos por τ_Γ) está dada por:

$$\tau_\Gamma = \left\{ U \subset \Gamma_{met} \mid p^{-1}(U) \in \tau_\sqcup \right\}. \quad (2.4)$$

Ahora tenemos que nuestro grafo métrico Γ_{met} es un espacio topológico; pero aún nos falta definir una métrica sobre él. Para construir tal métrica, primero probemos que el espacio Γ_{met} es arco-conexo. Se requiere el siguiente Lema.

Lema 1. *Sea (X, τ) un espacio topológico y $U_1, U_2, \dots, U_n \subset X$ conjuntos arco-conexos. Si $U_j \cap U_{j+1} \neq \emptyset$, $j = \overline{1, n-1}$, entonces $\bigcup_{j=1}^n U_j$ es arco-conexo.*

Demostración. Procedemos por inducción sobre n . Para $n = 2$, tómesese $x, y \in U_1 \cup U_2$ y veamos que existe una curva $\gamma : [0, 1] \rightarrow U_1 \cup U_2$ tal que $\gamma(0) = x$ y $\gamma(1) = y$.

Si $x, y \in U_1$ o $x, y \in U_2$, tal curva γ existe por la arco-conexidad de U_1 y U_2 . Supongamos sin perdida de generalidad que $x \in U_1$ y que $y \in U_2$. Por hipótesis, $U_1 \cap U_2 \neq \emptyset$, con lo cual podemos tomar $z \in U_1 \cap U_2$. Como $x, z \in U_1$, por arco-conexidad, existe una curva $\gamma_1 : [0, 1] \rightarrow U_1$ tal que $\gamma_1(0) = x$ y $\gamma_1(1) = z$. De igual forma, como $z, y \in U_2$ y éste es arco-conexo, existe $\gamma_2 : [0, 1] \rightarrow U_2$ tal que $\gamma_2(0) = z$ y $\gamma_2(1) = y$. Ahora, definamos

$$\gamma_3(t) := \begin{cases} \gamma_1(2t), & \text{si } 0 \leq t \leq \frac{1}{2}, \\ \gamma_2(2t - 1), & \text{si } \frac{1}{2} \leq t \leq 1. \end{cases}$$

Se tiene que $\gamma_3 : [0, 1] \rightarrow U_1 \cup U_2$ es continua (véase [27, cap. 2]) y $\gamma_3(0) = \gamma_1(0) = x$, $\gamma_3(1) = \gamma_2(1) = y$. Luego, γ_3 es una curva que conecta a x con y en $U_1 \cup U_2$. Puesto que $x, y \in U_1 \cup U_2$ fueron arbitrarios, concluimos que $U_1 \cup U_2$ es arco-conexo.

Ahora suponemos el resultado para $n - 1$ y probaremos para n . Notemos que por hipótesis:

$$\emptyset \neq U_{n-1} \cap U_n \subset \bigcup_{j=1}^{n-1} (U_j \cap U_n) = \left(\bigcup_{j=1}^{n-1} U_j \right) \cap U_n.$$

Así, $\left(\bigcup_{j=1}^{n-1} U_j \right) \cap U_n \neq \emptyset$. Como U_n es arco-conexo, y $\bigcup_{j=1}^{n-1} U_j$ también lo es por hipótesis de inducción, repitiendo el razonamiento hecho para dos conjuntos, tenemos que $\bigcup_{j=1}^n U_j = \left(\bigcup_{j=1}^{n-1} U_j \right) \cup U_n$ es arco-conexo.

Esto termina la inducción y prueba el resultado para toda n . **Q.E.D.**

Proposición 6. *El espacio $(\Gamma_{met}, \tau_\Gamma)$ es arco-conexo.*

Demostración. Sea $b \in \mathcal{B}$ y $\psi_b : [0, \ell(b)] \rightarrow \{b\} \times [0, \ell(b)]$ la inyección canónica definida en (2.3). Es claro que por definición ψ_b es una biyección, con lo cual $\{b\} \times [0, \ell(b)] = \psi_b([0, \ell(b)])$, y por construcción de τ_b se tiene que ψ_b es continua, entonces como $[0, \ell(b)]$ es arco-conexo y esta propiedad se preserva bajo funciones continuas, se tiene que $\{b\} \times [0, \ell(b)]$ es también arco-conexo. Ahora, notemos que τ_b es precisamente la restricción de la topología τ_\square a $\{b\} \times [0, \ell(b)]$, con lo cual éste conjunto es arco-conexo en $\prod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)]$. Tomando $J_b := p(\{b\} \times [0, \ell(b)])$, por la arco-conexidad de $\{b\} \times [0, \ell(b)]$ y la continuidad de la proyección p se tiene que J_b es arco-conexo en Γ_{met} , para cada $b \in \mathcal{B}$. Más aún, por sobreyectividad de p :

$$\Gamma_{met} = p \left(\prod_{b \in \mathcal{B}} [0, \ell(b)] \right) = p \left(\bigcup_{b \in \mathcal{B}} \{b\} \times [0, \ell(b)] \right) = \bigcup_{b \in \mathcal{B}} p(\{b\} \times [0, \ell(b)]) = \bigcup_{b \in \mathcal{B}} J_b$$

Ahora tomemos $(b, x)^\sim, (c, y)^\sim \in \Gamma_{met}$, con lo cual $(b, x)^\sim \in J_b$ y $(c, y)^\sim \in J_c$, y sean $v = \Pi((b, 0)^\sim)$ y $w = \Pi((c, 0)^\sim)$. Por la hipótesis 2 el grafo Γ es conexo, con lo cual existe una sucesión finita de aristas b_1, b_1, \dots, b_n y una sucesión de vértices v_0, v_1, \dots, v_n tales que $v_0 = v$, $v_n = w$ y $\{v_{i-1}, v_i\} = \{o(b_i), t(b_i)\}$ para $i = \overline{1, n}$.

Notemos que para $i = \overline{1, n}$, el vértice v_i pertenece tanto a $\{o(b_{i+1}), t(b_{i+1})\}$ como a $\{o(b_i), t(b_i)\}$. Entonces $\Pi((b_{i+1}, 0)^\sim) = v_i$ ó bien $\Pi((b_{i+1}, \ell(b_{i-1}))^\sim) = v_i$, y de igual forma $\Pi((b_i, 0)^\sim) = v_i$ ó $\Pi((b_i, \ell(b_i))^\sim) = v_i$. Sin pérdida de generalidad, podemos suponer que $\Pi((b_{i+1}, 0)^\sim) = v_i = \Pi((b_i, 0)^\sim)$, entonces como la función Π es inyectiva en Γ_{met} , se tiene que $(b_{i+1}, 0)^\sim = (b_i, 0)^\sim$, con lo cual $J_{b_{i+1}} \cap J_{b_i} \neq \emptyset$, para $i = \overline{0, n-1}$. Luego, por el lema 1, $\bigcup_{i=0}^n J_{b_i}$ es arco-conexo. De igual forma se puede ver que $J_b \cup (\bigcup_{i=0}^n J_{b_i}) \cup J_c$ es arco-conexo.

Finalmente, como $(b, x)^\sim, (c, y)^\sim \in J_b \cup (\bigcup_{i=0}^n J_{b_i}) \cup J_c$, existe una curva $\gamma : [0, 1] \rightarrow J_b \cup (\bigcup_{i=0}^n J_{b_i}) \cup J_c \subset \Gamma_{met}$ tal que $\gamma(0) = (b, x)^\sim$ y $\gamma(1) = (c, y)^\sim$. Puesto que $(b, x)^\sim$ y $(c, y)^\sim$ fueron arbitrarios, se sigue que Γ_{met} es arco-conexo.

Q.E.D.

Ahora se introducirá una métrica en Γ_{met} . Para esto, primero se analizarán algunas propiedades “locales” de Γ_{met} .

Definición 20. Las **inyecciones canónicas** en Γ_{met} , son las funciones $\varphi_b : [0, \ell(b)] \rightarrow \Gamma_{met}$ definidas por:

$$\varphi_b := p|_{\{b\} \times [0, \ell(b)]} \circ \psi_b, \quad (2.5)$$

para cada $b \in \mathcal{B}$.

De aquí en adelante, a menos que se especifique lo contrario, siempre que se hable de inyecciones canónicas, se entenderá que nos referimos a las funciones (2.5). Explícitamente, las inyecciones canónicas actúan de la siguiente manera:

$$\varphi_b(x) = p(\psi_b(x)) = (b, x)^\sim, \quad x \in [0, \ell(b)].$$

Definición 21. Para cada $b \in \mathcal{B}$, se define la **arista métrica** asociada a $b \in \mathcal{B}$ en Γ_{met} , como:

$$J_b := \varphi_b([0, \ell(b)]). \quad (2.6)$$

La acción de la proyección canónica φ_b se ilustra en el siguiente diagrama conmutativo:

$$\begin{array}{ccc} [0, \ell(b)] & \xrightarrow{\psi_b} & \{b\} \times [0, \ell(b)] \\ & \searrow \varphi_b & \downarrow p \\ & & J_b \end{array}$$

Proposición 7. Para cada $b \in \mathcal{B}$, la inyección canónica φ_b es un homeomorfismo de $[0, \ell(b)]$ con J_b .

Demostración. Sea $b \in \mathcal{B}$ y $\varphi_b : [0, \ell(b)] \rightarrow J_b$. Por definición de J_b , se tiene que φ_b es una sobreyección de $[0, \ell(b)]$ en J_b . Recordemos además que ψ_b es inyectiva de $[0, \ell(b)]$ en $\{b\} \times [0, \ell(b)]$. También se cumple que:

$$\text{Si } b, c \in \mathcal{B} \text{ y } b = c, \text{ entonces } (b, x) \sim (c, y) \Leftrightarrow x = y$$

(recordemos que por la hipótesis 2 no hay lazos), con lo cual $p|_{\{b\} \times [0, \ell(b)]}$ es inyectiva. Como $\varphi_b = p|_{\{b\} \times [0, \ell(b)]} \circ \psi_b$, tenemos que φ_b es inyectiva, de modo que es una biyección.

Para ver que φ_b es homeomorfismo, observemos que por ser ψ_b y p continuas, φ_b es continua. Además, si $U \in \tau_{[0, \ell(b)]}$, por ser ψ_b inyectiva tenemos $U = \psi_b^{-1}(\psi_b(U))$, con lo cual por definición de τ_{\sqcup} se tiene que $\psi_b(U) \in \tau_{\sqcup}$, y como hemos visto ya que $p|_{\{b\} \times [0, \ell(b)]}$ es inyectiva, entonces $p^{-1}(p(\psi_b(U))) = \psi_b(U) \in \tau_{\sqcup}$. Luego por la definición de la topología cociente, se tiene que $\varphi_b(U) = p(\psi_b(U)) \in \tau_{\Gamma}$. Así, φ_b es una función continua, biyectiva y abierta, de manera que es un homeomorfismo. **Q.E.D.**

La idea ahora es utilizar las aristas métricas como base para todas las construcciones que se harán con el espacio Γ_{met} . Primero daremos una caracterización de la topología τ_{Γ} .

Proposición 8.

$$\tau_{\Gamma} = \left\{ U \subset \Gamma_{met} \mid \forall b \in \mathcal{B} \quad \varphi_b^{-1}(U \cap J_b) \in \tau_{[0, \ell(b)]} \right\}. \quad (2.7)$$

Demostración. Se tiene que:

$$\begin{aligned} U \in \tau_{\Gamma} &\Leftrightarrow p^{-1}(U) \in \tau_{\sqcup} \quad (\text{Def. de topología cociente}) \\ (\text{Def. de } \tau_{\sqcup}) &\Leftrightarrow \forall b \in \mathcal{B} \quad p^{-1}(U) \cap (\{b\} \times [0, \ell(b)]) \in \tau_b \\ (p^{-1}(J_b) = \{b\} \times [0, \ell(b)]) &\Leftrightarrow \forall b \in \mathcal{B} \quad p^{-1}(U) \cap p^{-1}(J_b) \in \tau_b \\ (\text{Def. de } \tau_b) &\Leftrightarrow \forall b \in \mathcal{B} \quad \psi_b^{-1}(p^{-1}(U \cap J_b)) \in \tau_{[0, \ell(b)]} \\ (\text{Def. de } \varphi_b) &\Leftrightarrow \forall b \in \mathcal{B} \quad \varphi_b^{-1}(U \cap J_b) \in \tau_{[0, \ell(b)]}. \end{aligned}$$

Q.E.D.

Así, τ_{Γ} es la topología más fuerte que hace continua a la familia de inyecciones canónicas $(\varphi_b : [0, \ell(b)] \rightarrow \Gamma_{met})_{b \in \mathcal{B}}$

Introducimos la siguiente métrica en cada arista J_b :

$$d_b((b, x)^{\sim}, (b, y)^{\sim}) := |\varphi_b^{-1}((b, x)^{\sim}) - \varphi_b^{-1}((b, y)^{\sim})|. \quad (2.8)$$

Aquí $|\cdot|$ denota el valor absoluto en \mathbb{R} . Denotamos la bola centrada en $(b, x)^{\sim} \in J_b$ de radio $r > 0$ generada por d_b como $B_b((b, x)^{\sim}, r)$.

Puesto que $\varphi_b : [0, \ell(b)] \rightarrow J_b$ es una biyección, se tiene que (2.8) es una métrica en J_b y además cumple la siguiente propiedad.

Proposición 9. Para cada $b \in \mathcal{B}$, la métrica d_b induce la topología restringida a J_b .

Demostración. Por la proposición 8, $\tau_{J_b} = \{U \subset J_b \mid \varphi_b^{-1}(U) \in \tau_{[0, \ell(b)]}\}$. Notemos que

$$\begin{aligned} \varphi_b^{-1}(B_b((b, x)^\sim, r)) &= \{y \in [0, \ell(b)] \mid d_b((b, x)^\sim, \varphi_b(y)) < r\} \\ &= \{y \in [0, \ell(b)] \mid |\varphi_b^{-1}((b, x)^\sim) - \varphi_b^{-1}(\varphi_b(y))| < r\} \\ &= \{y \in [0, \ell(b)] \mid |\varphi_b^{-1}((b, x)^\sim) - y| < r\} \\ &= B_{[0, \ell(b)]}(\varphi_b^{-1}((b, x)^\sim), r). \end{aligned}$$

Entonces $B_b((b, x)^\sim, r) \in \tau_{J_b}$, para cada $(b, x)^\sim \in J_b$ y $r > 0$. Por otra parte, si $U \in \tau_{J_b}$, entonces $V = \varphi_b^{-1}(U) \in \tau_{[0, \ell(b)]}$, y además por la definición de abierto en un espacio métrico:

$$V = \bigcup_{x \in V} B_{[0, \ell(b)]}(x, \epsilon_x),$$

para ciertos $\epsilon_x > 0$. Luego, como φ_b es biyectiva

$$U = \bigcup_{x \in V} \varphi_b(B_{[0, \ell(b)]}(x, \epsilon_x)).$$

Hemos visto que $\varphi_b^{-1}(B_b((b, x)^\sim, r)) = B_{[0, \ell(b)]}(\varphi_b^{-1}((b, x)^\sim), r)$, con lo cual, por la biyectividad de φ_b y la definición de d_b , se tiene que $\varphi_b(B_{[0, \ell(b)]}(x, r)) = B_b(\varphi_b(x), r)$, entonces:

$$U = \bigcup_{x \in V} B_b(\varphi_b(x), \epsilon_x)$$

\therefore La topología τ_{J_b} es generada por la métrica d_b .

Q.E.D.

En consecuencia, se tiene que “localmente” Γ_{met} es un espacio métrico. Ahora se extenderá esta métrica a todo el espacio. Observamos que en la demostración de la proposición 6, se obtuvo la siguiente propiedad:

Supongamos que $(b, x)^\sim, (c, y)^\sim \in \Gamma_{met}$ y que $b \neq c$. Entonces existe una sucesión finita de aristas b_0, \dots, b_n tales que:

- (i) $(b, x)^\sim \in J_{b_0}$ y $(c, y)^\sim \in J_{b_n}$.
- (ii) $J_{b_{i-1}} \cap J_{b_i} \neq \emptyset$, $i = \overline{1, n}$.
- (iii) $\bigcup_{i=0}^n J_{b_i}$ es arco-conexo.

Introducimos ahora la siguiente notación: por un **vértice métrico**, entenderemos un punto $(b, x)^\sim \in \Gamma_{met}$ tal que $\Pi((b, x)^\sim) \in \mathcal{V}$. Denotamos la colección de vértices métricos por \mathcal{V}_{met} . Notemos que $J_{b_{i-1}} \cap J_{b_i}$ consta precisamente de un vértice métrico. En efecto, si $(b, x)^\sim \in J_b \cap J_c$ y $b \neq c$, entonces, no puede ocurrir que $\Pi((b, x)^\sim) \in \mathcal{B}$, con lo cual tiene que ser un vértice métrico. Por la hipótesis 2, no hay lazos ni aristas múltiples, con lo cual cada arista métrico contiene exactamente 2 vértices métrico (uno de origen y otro terminal), y sólo se pueden intersectar en uno.

Denotaremos entonces $\tilde{v}_i = J_{b_{i-1}} \cap J_{b_i}$, para $i = \overline{1, n}$. Así $\{\tilde{v}_i, v_{i+1}\} \subset J_{b_i}$ con lo cual podemos calcular $d_{b_0}((b, x)^\sim, \tilde{v}_1)$, $d_{b_n}((c, y)^\sim, \tilde{v}_n)$ y $d_{b_i}(\tilde{v}_i, v_{i+1})$, $i = \overline{2, n-1}$.

Con base en estas observaciones introducimos la siguiente definición.

Definición 22. Sean $(b, x)^\sim, (c, y)^\sim \in \Gamma_{met}$. Diremos que una sucesión finita $p = (\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)$ de puntos de Γ_{met} *conecta adecuadamente* a $(b, x)^\sim$ con $(c, y)^\sim$, si

- (i) $\tilde{x}_0 = (b, x)^\sim, \tilde{x}_n = (c, y)^\sim$.
- (ii) Existe una sucesión $b_1, \dots, b_n \in \mathcal{B}$ tal que $\{x_{i-1}^\sim, \tilde{x}_i\} \subset J_{b_i}, i = \overline{1, n}$.

Denotamos la colección de todas las sucesiones que conectan adecuadamente a $(b, x)^\sim$ con $(c, y)^\sim$ como $\mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(c, y)^\sim}$.

Como se observó en los comentarios previos a la definición, $\mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(c, y)^\sim} \neq \emptyset$. Además, puesto que $\{x_{i-1}^\sim, \tilde{x}_i\} \subset J_{b_i}$, podemos calcular $d_{b_i}(x_{i-1}^\sim, \tilde{x}_i), i = \overline{1, n}$, e introducir la siguiente definición.

Definición 23. Sean $(b, x)^\sim, (c, y)^\sim \in \Gamma_{met}$. Dado $p \in \mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(c, y)^\sim}$, se define su *longitud* como:

$$l(p) := \sum_{i=1}^n d_{b_i}(x_{i-1}^\sim, \tilde{x}_i).$$

Observación 2. Dados $(b, x)^\sim, (c, y)^\sim, (d, z)^\sim \in \Gamma_{met}$ se cumple:

(i) $p = (\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n) \in \mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(c, y)^\sim} \implies p^- := (\tilde{x}_n, \tilde{x}_{n-1}, \dots, \tilde{x}_0) \in \mathcal{P}_{(c, y)^\sim}^{(b, x)^\sim}$
y $l(p) = l(p^-)$.

(ii) Si $p = (\tilde{x}_0, \dots, \tilde{x}_n) \in \mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(c, y)^\sim}$ y $q = (\tilde{y}_0, \dots, \tilde{y}_m) \in \mathcal{P}_{(c, y)^\sim}^{(d, z)^\sim}$, entonces

$$p \vee q := (\tilde{x}_0, \dots, \tilde{x}_n, \tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_m) \in \mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(d, z)^\sim},$$

$$\text{y } l(p \vee q) = l(p) + l(q).$$

(iii) Si $(b, x)^\sim \in J_b, (c, y)^\sim \in J_c$ y $b \neq c$, entonces cualquier $p \in \mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(c, y)^\sim}$ debe contener un vértice incidente en una arista que contiene a $(b, x)^\sim$. Explícitamente, si $p = (\tilde{x}_0, \dots, \tilde{x}_n)$, existe $0 \leq k < n$ y $e \in \mathcal{B}$ tales que: $\{\tilde{x}_0, \dots, \tilde{x}_k\} \subset J_e$, pero $x_{k+1}^\sim \notin J_e$, de modo que \tilde{x}_k es un vértice métrico incidente en J_e (ver figura 2.1).

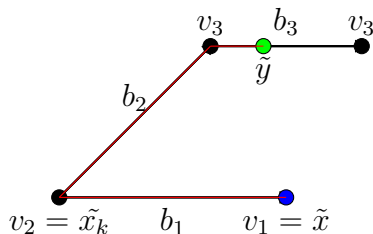


Figura 2.1: Una sucesión contenida en diferentes aristas, con $e = b_1$.

Con estas observaciones estamos listos para introducir una métrica en Γ_{met} .

Definición 24. Se define la función $d_\Gamma : \Gamma_{met} \times \Gamma_{met} \rightarrow \mathbb{R}$ como

$$d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) := \inf \left\{ l(p) \mid p \in \mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(c, y)^\sim} \right\}, \quad \text{para } (b, x)^\sim, (c, y)^\sim \in \Gamma_{met}.$$

El siguiente paso ahora es probar que la función d_Γ es una métrica en Γ_{met} . Para esto, será de utilidad el siguiente lema técnico.

Lema 2. Sean $(b, x)^\sim, (c, y)^\sim \in \Gamma_{met}$ dos puntos distintos. Definamos

$$\beta := \min\{d_e((b, x)^\sim, \tilde{v}) \mid e \in \mathcal{B}, \tilde{v} \in \mathcal{V}_{met} \cap J_e, (b, x)^\sim \in J_e \text{ y } \tilde{v} \neq (b, x)^\sim\}. \quad (2.9)$$

(i) Si $(b, x)^\sim, (c, y)^\sim \in J_b$ (i.e., pertenecen a la misma arista métrica), entonces:

$$d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) \geq \min\{\beta, d_b((b, x)^\sim, (c, y)^\sim)\}. \quad (2.10)$$

(ii) Si $(b, x)^\sim \in J_b, (c, y)^\sim \in J_c$ y $b \neq c$, entonces

$$d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) \geq \beta. \quad (2.11)$$

Demostración. Sea $p = (\tilde{x}_0, \dots, \tilde{x}_n) \in \mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(c, y)^\sim}$.

(i) Primero supongamos que existe una subsucesión $(\tilde{x}_{n_0}, \dots, \tilde{x}_{n_I})$ de p tal que: $\tilde{x}_{n_0} = (b, x)^\sim, \tilde{x}_{n_I} = (b, y)^\sim$ y $\{\tilde{x}_{n_0}, \dots, \tilde{x}_{n_I}\} \subset J_b$. Entonces:

$$l(p) \geq \sum_{i=1}^I d_{b_i}(\tilde{x}_{n_{i-1}}, \tilde{x}_{n_i}) \geq d_b((b, x)^\sim, (b, x)^\sim).$$

Por otra parte, si tal subsucesión no existe, podemos tomar una subsucesión $(\tilde{x}_{n_0}, \dots, \tilde{x}_{n_K})$ de p tal que: $\tilde{x}_{n_0} = (b, x)^\sim, \tilde{x}_{n_K} \in \mathcal{V} \setminus \{(b, x)^\sim\}$, y la colección de puntos $\{\tilde{x}_{n_0}, \dots, \tilde{x}_{n_K}\} \subset J_e$, para alguna $e \in \mathcal{B}$. De este modo:

$$l(p) \geq \sum_{i=1}^K d_{b_i}(\tilde{x}_{n_{i-1}}, \tilde{x}_{n_i}) \geq d_e((b, x)^\sim, \tilde{x}_{n_K}) > 0.$$

Definamos β como en (2.9), y notemos que por la hipótesis 2 (ii), β se toma sobre una cantidad finita de elementos, con lo cual está bien definida, luego, de la desigualdad anterior, se sigue que $l(p) \geq \beta$.

Combinando ambos casos se tiene que:

$$l(p) \geq \min\{\beta, d_b((b, x)^\sim, (c, y)^\sim)\}, \quad \forall p \in \mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(c, y)^\sim}.$$

Entonces, tomando el ínfimo concluimos que:

$$d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) \geq \min\{\beta, d_b((b, x)^\sim, (c, y)^\sim)\}.$$

(ii) En este caso, por la observación 2 (iii), existe un vértice métrico \tilde{x}_k de la sucesión, y una arista e tales que: $\{\tilde{x}_0, \dots, \tilde{x}_k\} \subset J_e$ y $\tilde{x}_k \neq (b, x)^\sim$. Luego:

$$l(p) \geq \sum_{i=1}^k d_{b_i}(\tilde{x}_{i-1}, \tilde{x}_i) \geq d_e((b, x)^\sim, \tilde{x}_k)$$

De esta desigualdad deducimos que: $\forall p \in \mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(c, y)^\sim} \ell(p) \geq \beta$. Al tomar ínfimos concluimos que $d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) \geq \beta > 0$.

Teorema 12. d_Γ es una métrica en Γ_{met} .

Demostración. Sean $(b, x)^\sim, (c, y)^\sim, (d, z)^\sim \in \Gamma_{met}$.

1. Para cada $p \in \mathcal{P}_{(b,x)^\sim}^{(c,y)^\sim}$, $l(p) \geq 0$, con lo cual $d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) \geq 0$. Además, como $p' = ((b, x)^\sim) \in \mathcal{P}_{(b,x)^\sim}^{(b,x)^\sim}$ y $l(p') = 0$, entonces $d_\Gamma((b, x)^\sim, (b, x)^\sim) = 0$.
2. Por la observación 2 (i):

$$\begin{aligned} d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) &= \inf \left\{ l(p) \mid p \in \mathcal{P}_{(b,x)^\sim}^{(c,y)^\sim} \right\} \\ &= \inf \left\{ l(p^-) \mid p \in \mathcal{P}_{(b,x)^\sim}^{(c,y)^\sim} \right\} \\ &= \inf \left\{ l(q) \mid q \in \mathcal{P}_{(c,y)^\sim}^{(b,x)^\sim} \right\} \\ &= d_\Gamma((c, y)^\sim, (b, x)^\sim) \end{aligned}$$

3. Supongamos que $(b, x)^\sim \neq (c, y)^\sim$. Procedemos por casos:

Caso 1 $b = c$. Por el lema 2 (i), se tiene que

$$d_\Gamma((b, x)^\sim, (b, y)^\sim) \geq \min\{\beta, d_b((b, x)^\sim, (b, y)^\sim)\},$$

donde

$$\beta := \min\{d_e((b, x)^\sim, \tilde{v}) \mid e \in \mathcal{B}, \tilde{v} \in \mathcal{V}_{met} \cap J_e, (b, x)^\sim \in J_e \text{ y } \tilde{v} \neq (b, x)^\sim\}.$$

Por la hipótesis 2, Γ es conexo, de modo que el mínimo se toma sobre un conjunto finito de elementos positivos, con lo cual $\beta > 0$. Por otro lado, d_b es una métrica en J_b , con lo cual $d_b((b, x)^\sim, (b, y)^\sim) > 0$, entonces $d_\Gamma((b, x)^\sim, (b, y)^\sim) > 0$.

Caso 2 $b \neq c$. En este caso aplicamos el lema 2 (ii), de modo que $d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) \geq \beta$, y de igual forma que en el caso anterior, $\beta > 0$. Así, $d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) > 0$.

En conclusión $d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) = 0$ si y sólo si $(b, x)^\sim = (c, y)^\sim$.

4. Sean $r \in \mathcal{P}_{(b,x)^\sim}^{(d,z)^\sim}$ y $q \in \mathcal{P}_{(d,z)^\sim}^{(c,y)^\sim}$. Por la observación 2 (ii), $r \vee q \in \mathcal{P}_{(b,x)^\sim}^{(c,y)^\sim}$ y

$$d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) \leq l(r \vee q) = l(r) + l(q).$$

Luego:

$$d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) - l(r) \leq l(q), \quad \forall q \in \mathcal{P}_{(d,z)^\sim}^{(c,y)^\sim},$$

con lo que al tomar ínfimos se tiene:

$$d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) - l(r) \leq d_\Gamma((d, z)^\sim, (c, y)^\sim).$$

Ahora notamos que también se cumple:

$$d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) - d_\Gamma((d, z)^\sim, (c, y)^\sim) \leq l(r), \quad \forall r \in \mathcal{P}_{(b,x)^\sim}^{(d,z)^\sim},$$

y tomando el ínfimo tenemos que:

$$d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) - d_\Gamma((d, z)^\sim, (c, y)^\sim) \leq d_\Gamma((b, x)^\sim, (d, z)^\sim).$$

$$\therefore d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) \leq d_\Gamma((b, x)^\sim, (d, z)^\sim) + d_\Gamma((d, z)^\sim, (c, y)^\sim).$$

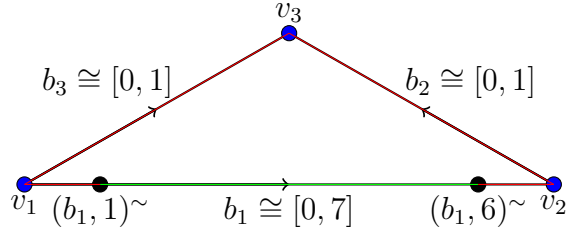


Figura 2.2: Un grafo que no está encajado en \mathbb{R}^2

$\therefore d_\Gamma$ es una métrica en Γ_{met} .

Q.E.D.

Ahora que ya tenemos una métrica en nuestro espacio Γ_{met} , es importante analizar las propiedades que cumple. Consideremos $(b, x)^\sim, (c, y)^\sim \in \Gamma_{met}$ y tales que $b = c$, entonces $p = ((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) \in \mathcal{P}_{(b, x)^\sim}^{(c, y)^\sim}$, con lo cual,

$$d_b((b, x)^\sim, (c, y)^\sim) \geq d_\Gamma((b, x)^\sim, (c, y)^\sim). \quad (2.12)$$

No obstante, la desigualdad puede ser estricta, como veremos en el siguiente ejemplo.

Ejemplo 1. Consideremos el grafo Γ de la figura 2.2. Los puntos $(b_1, 1)^\sim$ y $(b_1, 6)^\sim$ tienen la distancia usual $d_{d_1}((b_1, 1)^\sim, (b_1, 6)^\sim) = 5$.

Sin embargo, si tomamos la sucesión $p = ((b_1, 1)^\sim, v_1, v_3, v_2, (b_1, 6)^\sim) \in \mathcal{P}_{(b_1, 1)^\sim}^{(b_1, 6)^\sim}$, la cual está marcada de color rojo en la figura 2.2, tenemos que $l(p) = 4$. De hecho, $d_\Gamma((b_1, 1)^\sim, (b_1, 6)^\sim) = 4$.

La razón de esto es que el grafo Γ **no está encajado** en \mathbb{R}^2 . Recordemos que la definición formal de Γ_{met} sería:

$$\Gamma_{met} := ((\{b_1\} \times [0, 7]) \cup (\{b_2\} \times [0, 1]) \cup (\{b_3\} \times [0, 1])) / \sim$$

donde \sim identifica los puntos $(b_1, 0) \sim (b_3, 0)$, $(b_3, 1) \sim (b_2, 1)$, $(b_2, 0) \sim (b_1, 7)$. Por supuesto $\Gamma_{met} \not\subset \mathbb{R}^2$, y este “triángulo”, no satisface la desigualdad triangular euclídea.

En lo que resta denotaremos:

$$B_\Gamma(\tilde{x}, r) := \{\tilde{y} \in \Gamma_{met} \mid d_\Gamma(\tilde{x}, \tilde{y}) < r\}.$$

Teorema 13. *La topología τ_Γ es generada por la métrica d_Γ .*

Demostración. Primero veamos que si $U \in \tau_\Gamma$, para cada $\tilde{x} \in U$ existe $\epsilon > 0$ tal que $B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \subset U$. Tómese $\tilde{x} \in U$ y $b \in \mathcal{B}$ tal que $\tilde{x} \in J_b$. Entonces por la proposición 8, $V = \varphi_b^{-1}(U \cap J_b)$ es abierto en $[0, \ell(b)]$ y $x = \varphi_b^{-1}(\tilde{x}) \in V$, con lo cual existe $\epsilon_b > 0$ tal que:

$$B_{[0, \ell(b)]}(x, \epsilon_b) \subset V.$$

Tomemos

$$\epsilon^* = \min\{\epsilon_b \mid b \in \mathcal{B} \text{ y } \tilde{x} \in J_b\},$$

$$\beta := \min\{d_b(\tilde{x}, \tilde{v}) \mid b \in \mathcal{B}, \tilde{v} \in \mathcal{V}_{met} \cap J_b, \tilde{x} \in J_b \text{ y } \tilde{v} \neq \tilde{x}\}$$

y $\epsilon = \min\{\epsilon^*, \beta\}$. Veamos que con nuestra elección de ϵ , $B_b(\tilde{x}, \epsilon) = B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b$.

En efecto, si $\tilde{y} \in B_b(\tilde{x}, \epsilon)$, por la desigualdad (2.12), $d_\Gamma(\tilde{x}, \tilde{y}) \leq d_b(\tilde{x}, \tilde{y}) < \epsilon$, luego $\tilde{y} \in B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b$.

Recíprocamente, suponer que $\tilde{y} \in B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b$, pero que $d_b(\tilde{x}, \tilde{y}) \geq \epsilon$, de modo que $\tilde{x} \neq \tilde{y}$. Por el lema 2 (i), se tiene que $d_\Gamma(\tilde{x}, \tilde{y}) \geq \min\{\beta, d_b(\tilde{x}, \tilde{y})\}$. Observemos que $\beta \geq \epsilon$, mientras que por hipótesis, $d_b(\tilde{x}, \tilde{y}) \geq \epsilon$. Entonces $d_\Gamma(\tilde{x}, \tilde{y}) \geq \epsilon$, lo cual es una contradicción.

De este modo concluimos que $B_b(\tilde{x}, \epsilon) = B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b$. Luego:

$$B_{[0, \ell(b)]}(\varphi_b^{-1}(\tilde{x}), \epsilon) \subset V \Rightarrow B_d(\tilde{x}, \epsilon) \subset U \cap J_b \Rightarrow B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b \subset U \cap J_b.$$

Ahora veamos que $B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \subset U$. Para esto consideramos dos casos:

Supongamos primero que $\tilde{x} \notin \mathcal{V}_{met}$ y veamos que: $B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b = B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon)$. Sea $\tilde{y} \in B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \setminus J_b$. Como \tilde{x} y \tilde{y} pertenecen a aristas diferentes, del lema 2 (ii), se tiene que:

$$d_\Gamma(\tilde{x}, \tilde{y}) \geq \beta \geq \epsilon,$$

con lo cual $\tilde{y} \notin B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon)$. Entonces $B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) = B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b \subset U \cap J_b \subset U$.

Por otro lado, si $\tilde{x} \in \mathcal{V}_{met}$, veamos que $B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) = \bigcup_{b \in \mathcal{B}_{\tilde{x}}} B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b$. Sea $\tilde{y} \in \Gamma_{met} \setminus (\bigcup_{b \in \mathcal{B}_{\tilde{x}}} J_b)$. Nuevamente, por el lema 2 (ii), tenemos que:

$$d_\Gamma(\tilde{x}, \tilde{y}) \geq \beta \geq \epsilon,$$

de modo que $d_\Gamma(\tilde{x}, \tilde{y}) \geq \epsilon$, con lo que $\tilde{y} \notin B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon)$.

$$\therefore B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) = \bigcup_{b \in \mathcal{B}_{\tilde{x}}} B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b \subset \bigcup_{b \in \mathcal{B}_{\tilde{x}}} U \cap J_b \subset U.$$

Ahora sólo resta ver que dados $\tilde{x} \in \Gamma_{met}$ y $\epsilon > 0$, $B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \in \tau_\Gamma$. Tomemos $b \in \mathcal{B}$ tal que $B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b \neq \emptyset$ y veamos que $\varphi_b^{-1}(B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b)$ es abierto en $[0, \ell(b)]$ (si la intersección fuera vacía, la afirmación se cumpliría trivialmente).

Sea $y \in \varphi_b^{-1}(B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b)$, entonces $d_\Gamma(\tilde{x}, \varphi_b(y)) < \epsilon$. Tomemos $r = \epsilon - d_\Gamma(\tilde{x}, \varphi_b(y))$ y $z \in B_{[0, \ell(b)]}(y, r)$. Se tiene que:

$$\begin{aligned} d_\Gamma(\tilde{x}, \varphi_b(z)) &\leq d_\Gamma(\tilde{x}, \varphi_b(y)) + d_\Gamma(\varphi_b(y), \varphi_b(z)) \\ \text{(Desigualdad (2.12))} &\leq d_\Gamma(\tilde{x}, \varphi_b(y)) + d_b(\varphi_b(y), \varphi_b(z)) \\ &= d_\Gamma(\tilde{x}, \varphi_b(y)) + |y - z| \\ &< \epsilon. \end{aligned}$$

Así, $d_\Gamma(\tilde{x}, \varphi_b(z)) < \epsilon$, i.e., $z \in \varphi_b^{-1}(B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b)$. Luego $B_{[0, \ell(b)]}(y, r) \subset \varphi_b^{-1}(B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b)$. Como esto ocurre para toda $y \in \varphi_b^{-1}(B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b)$, se tiene que $\varphi_b^{-1}(B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \cap J_b)$ es abierto en $[0, \ell(b)]$. Puesto que $b \in \mathcal{B}$ es arbitrario, concluimos que $B_\Gamma(\tilde{x}, \epsilon) \in \tau_\Gamma$.

$\therefore \tau_\Gamma$ es inducida por la métrica d_Γ .

Q.E.D.

Se ha construido un espacio métrico (Γ_{met}, d_Γ) a partir de los datos proporcionados por la definición del grafo métrico Γ , lo cual justifica el nombre de “métrico”.

Ahora analizaremos algunas propiedades que Γ_{met} posee como espacio métrico. Para evitar ciertos comportamientos “patológicos”, se impondrá la siguiente condición estándar, la cual es considerada en algunos trabajos, por ejemplo [6].

Hipótesis 3. Las longitudes de todas las aristas están acotadas uniformemente por abajo, i.e.

$$\exists \ell_0 > 0 : \forall b \in \mathcal{B} \quad \ell_0 \leq \ell(b). \quad (2.13)$$

Notemos que un grafo finito (i.e. con un número finito de vértices) satisface siempre la hipótesis 3. No obstante, nos permitirá caracterizar ciertas propiedades para grafos infinitos.

Teorema 14. *Un grafo métrico es compacto si y sólo si es finito.*

Demostración. [\Leftarrow] Supongamos que Γ tiene sólo un número finito de vértices. Entonces sólo hay un número finito de aristas b_1, \dots, b_n , y además

$$\Gamma_{met} = \bigcup_{j=1}^n J_{b_j}.$$

Como J_{b_j} es homeomorfo al intervalo compacto $[0, \ell(b_j)]$, tenemos que J_{b_j} es compacto, para $j = \overline{1, n}$. Luego, Γ_{met} es compacto (por ser union finita de compactos).

[\Rightarrow] Supóngase que Γ_{met} es compacto y que tiene un número infinito de vértices. Entonces por el teorema de Bolzano-Weierstrass, la compacidad de Γ_{met} implica que \mathcal{V}_{met} contiene un punto de acumulación. Sin embargo, por la hipótesis 3, si ℓ_0 es una cota inferior para las longitudes de las aristas, dados $\tilde{v} \neq \tilde{w}$ vértices métricos

$$d_{\Gamma}(\tilde{v}, \tilde{w}) \geq \ell_0.$$

En efecto, si \tilde{v}, \tilde{w} pertenecen a J_b para alguna arista b , por el lema 2 (i) tenemos que:

$$d_{\Gamma}(\tilde{v}, \tilde{w}) \geq \min\{\beta, d_b(\tilde{v}, \tilde{w})\},$$

donde β está dada por (2.9). Sin embargo, como $\tilde{v} \in \mathcal{V}_{met}$, β puede escribirse como:

$$\beta = \min\{d_e(\tilde{v}, \tilde{u}) \mid e \in \mathcal{B}_{\tilde{v}} \text{ y } \tilde{u} \in J_b \setminus \{\tilde{v}\}\} \geq \ell_0.$$

Por su parte, $d_b(\tilde{v}, \tilde{w}) = \ell(b) \geq \ell_0$, con lo cual $d_{\Gamma}(\tilde{v}, \tilde{w}) \geq \ell_0$.

Por otro lado, si \tilde{v}, \tilde{w} pertenecen a aristas diferentes, por el lema 2 (ii), se cumple que: $d_{\Gamma}(\tilde{v}, \tilde{w}) \geq \beta \geq \ell_0$. En cualquier caso, $d_{\Gamma}(\tilde{v}, \tilde{w}) \geq \ell_0$.

Así, las bolas $\{B_{\Gamma}(\tilde{v}, \frac{\ell}{2})\}_{\tilde{v} \in \mathcal{V}_{met}}$ son disjuntas, con lo cual los vértices métricos forman un conjunto de puntos aislados y no pueden tener un punto de acumulación.

Esta contradicción nos lleva a que si Γ_{met} es compacto, entonces sólo puede tener un número finito de vértices.

Q.E.D.

Siguiendo a [6], se impondrá la siguiente condición de finitud a las bolas $B_{\Gamma}(\tilde{x}, r)$.

Hipótesis 4 (Condición de bolas finitas). Para cada $\tilde{x} \in \Gamma_{met}$ y $r > 0$, la bola $B_{\Gamma}(\tilde{x}, r)$ contiene sólo un número finito de vértices métricos.

Como consecuencia, se tiene que cada bola centrada en un vertice $B_\Gamma(v, r)$, esta contenida en una unión finita de aristas métricas: $B_\Gamma(v, r) \subset \bigcup_{j=1}^n J_{b_j}$

Con esta hipótesis podemos probar la completitud de nuestro grafo métrico

Proposición 10. (Γ_{met}, d_Γ) es un espacio métrico completo.

Demostración. Sea $\{\tilde{x}_n\}_{n=0}^\infty \subset \Gamma_{met}$ una sucesión de Cauchy. Tomando $\epsilon = \ell$ tenemos que existe un $N > 0$ tal que

$$n, m \geq N \Rightarrow d_\Gamma(\tilde{x}_n, \tilde{x}_m) < \ell$$

Así, la cola $\{\tilde{x}_n\}_{n=N+1}^\infty$ de la sucesión está contenida en la bola $B_\Gamma(x_{N+1}, \ell)$.

Por la hipótesis 4, $B_\Gamma(x_{N+1}, \ell) \subset \bigcup_{j=1}^M J_{b_j}$, para algunas aristas b_1, \dots, b_M . Por el teorema 14, esta union finita de aristas métricas es compacta, con lo cual es completa y al ser la cola $\{\tilde{x}_n\}_{n=N+1}^\infty$ una sucesión de Cauchy, debe converger a un punto de $\tilde{x} \in \bigcup_{j=1}^M J_{b_j} \subset \Gamma_{met}$.

Como la cola converge a \tilde{x} , la sucesión original también debe converger a éste punto. Luego, Γ_{met} es completo.

Q.E.D.

2.2. Funciones continuas sobre grafos métricos

Una vez estudiadas las propiedades métricas del grafo Γ_{met} , nuestro interés se centra en las funciones continuas definidas sobre este espacio. A diferencia de ciertas áreas de la matemática discreta, donde las funciones sobre Γ están definidas sobre los vértices, $f : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{C}$, en este trabajo se estudiarán funciones definidas sobre el grafo métrico subyacente Γ_{met} . Así, cuando se hable de una *función continua* sobre el grafo Γ , nos referimos a una función $f : \Gamma_{met} \rightarrow \mathbb{C}$, continua en la topología del espacio Γ_{met} .

Como se mencionó en la sección anterior, las aristas métricas J_b definen la topología en Γ_{met} , con lo cual la continuidad estará completamente determinada en cada una de estas aristas.

Teorema 15. Una función $f : \Gamma_{met} \rightarrow \mathbb{C}$ es continua si y sólo si, para cada $b \in \mathcal{B}$, la composición $f|_{J_b} \circ \varphi_b : [0, \ell(b)] \rightarrow \mathbb{C}$ es continua.

Demostración. $[\Rightarrow]$ Supongamos que $f : \Gamma_{met} \rightarrow \mathbb{C}$ es continua. Entonces para cada arista b la restricción $f|_{J_b}$ es continua en J_b . Luego, como $\varphi_b : [0, \ell(b)] \rightarrow \mathbb{C}$ es continua, se tiene que $f|_{J_b} \circ \varphi_b : [0, \ell(b)] \rightarrow \mathbb{C}$ es continua.

$[\Leftarrow]$ Supóngase ahora que para cada $b \in \mathcal{B}$ la composición $f|_{J_b} \circ \varphi_b$ es continua. Sea U abierto en \mathbb{C} , entonces se cumple:

$$\varphi_b^{-1}(f^{-1}(U) \cap J_b) = (f|_{J_b} \circ \varphi_b)^{-1}(U) \in \tau_{[0, \ell(b)]},$$

pues $f|_{J_b} \circ \varphi_b$ es continua. Como esto ocurre para cada $b \in \mathcal{B}$, por la proposición 8 se sigue que $f^{-1}(U) \in \tau_\Gamma$, luego f es continua. **Q.E.D.**

Con base en este resultado introducimos la siguiente notación: para una función $f : \Gamma_{met} \rightarrow \mathbb{C}$, definimos la familia de funciones $(\tilde{f}_b : [0, \ell(b)] \rightarrow \mathbb{C})_{b \in \mathcal{B}}$ dada por $\tilde{f}_b := f|_{J_b} \circ \varphi_b$. Entonces, el teorema 15 nos dice que f es continua en Γ_{met} , si y sólo si cada elemento de la familia $(\tilde{f}_b)_{b \in \mathcal{B}}$ es continua.

De este modo, hemos reducido el problema de estudiar la continuidad de una función en el grafo Γ , al análisis de ciertas funciones definidas en la familia de intervalos $\{[0, \ell(b)]\}_{b \in \mathcal{B}}$. Ésta es una técnica estandar en el estudio de la teoría de los grafos cuánticos, y se aplica no solo a continuidad, sino también a integrabilidad y diferenciabilidad, como veremos más adelante.

Ahora nos interesa analizar el problema inverso: dada una familia $(\tilde{f}_b)_{b \in \mathcal{B}}$ de funciones continuas definida en la familia de intervalos $\{[0, \ell(b)]\}_{b \in \mathcal{B}}$, ¿Cuándo definen una función continua en todo el grafo Γ_{met} ?

Primero, notemos que para cada $b \in \mathcal{B}$, la función “levantada” a la arista J_b dada por $f_b := \tilde{f}_b \circ \varphi_b^{-1} : J_b \rightarrow \mathbb{C}$ es continua. La relación entre las funciones \tilde{f}_b y las “levantadas” f_b puede verse en el siguiente diagrama:

$$\begin{array}{ccc} & J_b & \\ & \uparrow \varphi_b^{-1} & \searrow f_b \\ & [0, \ell(b)] & \xrightarrow{\tilde{f}_b} \mathbb{C} \end{array}$$

No obstante, a pesar de que una familia $(\tilde{f}_b)_{b \in \mathcal{B}} \in \prod_{b \in \mathcal{B}} \mathbb{C}^{[0, \ell(b)]}$ de funciones continuas define en efecto, una familia de funciones continuas en las aristas métricas, no necesariamente define una función en todo el grafo. En efecto, para poder extender la familia levantada $(f_b)_{b \in \mathcal{B}}$ éstas tienen que estar bien definidas en los vértices.

Explícitamente esto quiere decir que, dado $v \in \mathcal{V}$ y v^\sim su correspondiente vértice métrico en Γ_{met} (notemos que la función $\Pi : \Gamma_{met} \rightarrow \mathcal{V} \cup \mathcal{B}$ es inyectiva en \mathcal{V}_{met} , con lo cual \mathcal{V} y \mathcal{V}_{met} son equipotentes) se debe cumplir:

$$v^\sim \in J_b \cap J_c \Rightarrow f_b(v^\sim) = f_c(v^\sim).$$

Esto nos lleva a la siguiente definición.

Definición 25. Sean $v \in \mathcal{V}$, v^\sim su correspondiente vértice métrico en Γ_{met} y $g = (g_b)_{b \in \mathcal{B}} \in \prod_{b \in \mathcal{B}} \mathbb{C}^{[0, \ell(b)]}$ una familia de funciones continuas. Se define el **valor de la familia** g en v , como la colección

$$\mathbf{g}(v) := (g_b(\varphi_b^{-1}(v^\sim)))_{b \in \mathcal{B}_v}. \quad (2.14)$$

Diremos que g satisface la **condición de continuidad** en v , si

$$\forall b, c \in \mathcal{B}_v \quad g_b(\varphi_b^{-1}(v^\sim)) = g_c(\varphi_c^{-1}(v^\sim)). \quad (2.15)$$

Por la hipótesis 2 (ii), $\mathbf{g}(v) \in \mathbb{C}^{d_v}$ es un vector finito, y la definición de continuidad en v simplemente quiere decir que todas las componentes de este vector son iguales. De hecho, si $\mathcal{B}_v = \{b_1, \dots, b_{d_v}\}$, entonces $\mathbf{g}(v) = (g_{b_1}(\varphi_{b_1}^{-1}(v^\sim)), \dots, g_{b_{d_v}}(\varphi_{b_{d_v}}^{-1}(v^\sim)))$. Bajo estas condiciones, podemos garantizar que las familias de funciones continuas que satisfagan la “condición de continuidad” en cada vértice, definen funciones continuas en todo el grafo métrico. Para probar esto, requerimos el siguiente lema, bien conocido de topología y que puede encontrarse, por ejemplo, en [27, cap. 2]

Lema 3. [27, pág 108] Sean (X, τ) e (Y, σ) e.t. y $A, B \subset X$ conjuntos cerrados tales que $X = A \cup B$ y $A \cap B \neq \emptyset$. Sean $f : A \rightarrow Y$ y $g : B \rightarrow Y$ funciones continuas en A y B respectivamente y tales que $f(x) = g(x)$ para cada $x \in A \cap B$. Entonces la función $h : X \rightarrow Y$ dada por:

$$h(x) = \begin{cases} f(x), & \text{si } x \in A, \\ g(x), & \text{si } x \in B \end{cases}$$

está bien definida y es continua en X .

Se tiene entonces el siguiente teorema:

Teorema 16 (Condición de continuidad). Sea $f = (f_b)_{b \in \mathcal{B}} \in \prod_{b \in \mathcal{B}} \mathbb{C}^{[0, \ell(b)]}$ una familia de funciones continuas que en cada vértice satisface la condición de continuidad (2.15). Entonces la función $\hat{f} : \Gamma_{met} \rightarrow \mathbb{C}$ dada por:

$$\hat{f}((b, x)^\sim) := (f_b \circ \varphi_b^{-1})((b, x)^\sim), \quad \text{si } (b, x)^\sim \in J_b, \quad (2.16)$$

está bien definida y es continua en todo Γ_{met} .

Demostración. Para cada $b \in \mathcal{B}$ definamos $\hat{f}_b := f_b \circ \varphi_b^{-1}$. Entonces cada \hat{f}_b es continua en J_b , y se define

$$\hat{f}((b, x)^\sim) := \hat{f}_b((b, x)^\sim), \quad \text{si } (b, x)^\sim \in J_b.$$

Claramente f está bien definida y es continua en $(\bigcup_{b \in \mathcal{B}} J_b) \setminus \mathcal{V}_{met}$. Ahora, sea $v^\sim \in \mathcal{V}_{met}$ y $b, c \in \mathcal{B}_v$. Por la condición de continuidad (2.15), se tiene que $\hat{f}_b(v^\sim) = \hat{f}_c(v^\sim)$, con lo cual \hat{f} está bien definida en v^\sim . Por otra parte, \hat{f}_b es continua en J_b , \hat{f}_c es continua en J_c y ambas coinciden en $J_b \cap J_c = \{v^\sim\}$, luego por el lema 3, \hat{f} es continua en $J_b \cup J_c$, en particular es continua en v^\sim .

Como esto ocurre para cada vértice métrico v^\sim , tenemos que \hat{f} es continua en todo Γ_{met} .

Q.E.D.

2.3. Funciones medibles e integrables

Ahora que hemos caracterizado a las funciones continuas en Γ_{met} , y reducido el problema a considerar familias de funciones continuas en intervalos, que satisfagan la condición de continuidad en los vértices, nos enfocamos en desarrollar la teoría de integración sobre grafos métricos.

Para esto es necesario construir una σ -álgebra y una medida que, restringidas a cada arista métrico, sean similares a la σ -álgebra y la medida de Lebesgue en cada intervalo $[0, \ell(b)]$. De nueva cuenta, las proyecciones canónicas $\{\varphi_b\}_{b \in \mathcal{B}}$ jugarán un papel importante en la construcción de esta σ -álgebra.

Definición 26. La σ -álgebra canónica sobre Γ_{met} está dada por

$$\mathcal{L}_\Gamma := \{U \subset \Gamma_{met} \mid \forall b \in \mathcal{B} \varphi_b^{-1}(U \cap J_b) \in \mathcal{L}_{[0, \ell(b)]}\}, \quad (2.17)$$

donde $\mathcal{L}_{[0, \ell(b)]}$ es la σ -álgebra de Lebesgue en $[0, \ell(b)]$.

La demostración de que en efecto \mathcal{L}_Γ es una σ -álgebra, es similar a las pruebas de las proposiciones 5 y 8 (de hecho, \mathcal{L}_Γ es la σ -álgebra más grande que hace medibles a la familia de proyecciones canónicas $\{\varphi_b\}_{b \in \mathcal{B}}$).

Por supuesto, se puede definir una σ -álgebra en cada arista métrica como:

$$\mathcal{L}_b := \{U \subset J_b \mid \varphi_b^{-1}(U) \in \mathcal{L}_{[0, \ell(b)]}\}. \quad (2.18)$$

y en este caso:

$$\mathcal{L}_\Gamma = \{U \subset \Gamma_{met} \mid \forall b \in \mathcal{B} \ U \cap J_b \in \mathcal{L}_b\}$$

Esta última caracterización es de particular importancia, pues nos permite definir una medida en nuestro grafo. Primero, se define una medida en cada arista métrica J_b de la siguiente manera:

$$\mu_b(U) := \lambda(\varphi_b^{-1}(U)), \quad \text{para } U \in \mathcal{L}_b. \quad (2.19)$$

Aquí, λ es la medida de Lebesgue en \mathbb{R} .

De hecho, la fórmula (2.19) es en realidad un procedimiento estándar para dotar de una medida a un conjunto, por medio de una función medible con un espacio de medida. Explícitamente esto quiere decir que si (X, \mathcal{F}, μ) es un espacio de medida, S un conjunto y $\phi : X \rightarrow S$ un función, uno puede definir una σ -álgebra en S de la siguiente manera: $\mathcal{S} := \{U \subset S \mid \phi^{-1}(U) \in \mathcal{F}\}$. De este modo, ϕ es medible con respecto a las σ 's álgebras \mathcal{F}, \mathcal{S} y se define una medida en S como: $\eta(U) = \mu(\phi^{-1}(U))$, para $U \in \mathcal{S}$.

Esta técnica es común en la teoría de probabilidades y los detalles pueden ser encontrados en [11]. Una de las principales propiedades es la caracterización de las funciones medibles y las integrables.

Teorema 17. [11, pág 314] Sea (X, \mathcal{F}, μ) un espacio de medida y $f : X \rightarrow S$. Defínase $\mathcal{S} := \{U \subset S \mid \phi^{-1}(U) \in \mathcal{F}\}$ y $\eta(U) = \mu(\phi^{-1}(U))$, para $U \in \mathcal{S}$.

(i) (S, \mathcal{S}, η) es un espacio medible y ϕ es (μ, η) -medible.

(ii) Una función $f : S \rightarrow \mathbb{C}$ es η -medible si y sólo si $f \circ \phi : X \rightarrow \mathbb{C}$ es μ -medible.

(iii) $f \in L^1(S, \mathcal{S}, \eta)$ si y sólo si $f \circ \phi \in L^1(X, \mathcal{F}, \mu)$, en cuyo caso:

$$\int_S f d\eta = \int_X f \circ \phi d\mu.$$

Corolario 2. Para cada $b \in \mathcal{B}$ se cumple:

(i) $(J_b, \mathcal{L}_b, \mu_b)$ es un espacio medible y φ_b es $(\mathcal{L}_{[0, \ell(b)]}, \mathcal{L}_b)$ -medible.

(ii) Una función $f : J_b \rightarrow \mathbb{C}$ es \mathcal{L}_b -medible si y sólo si $f \circ \varphi_b$ es $\mathcal{L}_{[0, \ell(b)]}$ -medible.

(iii) $f \in L^1(J_b, \mathcal{L}_b, \mu_b)$ si y sólo si $f \circ \varphi_b \in L^1([0, \ell(b)], \mathcal{L}_{[0, \ell(b)]}, \lambda)$ y

$$\int_{J_b} f d\mu_b = \int_0^{\ell(b)} f \circ \varphi_b d\lambda. \quad (2.20)$$

Por simplicidad denotaremos $\int_{J_b} f d\mu_b =: \int_b f d\mu_b$. Ahora procedemos a extender las medidas μ_b a todo el grafo.

Definición 27. La medida de Lebesgue en el grafo Γ_{met} se define como:

$$\mu_\Gamma(U) := \sum_{b \in \mathcal{B}} \mu_b(U \cap J_b), \quad \text{para } U \in \mathcal{L}_\Gamma. \quad (2.21)$$

Como $U \in \mathcal{L}_\Gamma$, entonces $U \cap J_b \in \mathcal{L}_b$ y $\mu_b(U \cap J_b)$ está bien definida. La fórmula (2.21) se basa en el hecho de que $U = \bigcup_{b \in \mathcal{B}} (U \cap J_b)$ y en que cada vértice métrico $v^\sim \in J_b$ tiene medida nula $\mu_b(v^\sim) = 0$. Como cada sumando en el miembro derecho de (2.21) es no negativo, esta suma está bien definida y de hecho es una suma numerable (pues \mathcal{B} es numerable), aunque puede ser igual a $+\infty$.

Proposición 11. La función $\mu_\Gamma : \mathcal{L}_\Gamma \rightarrow [0, +\infty]$ definida por (2.21) es una medida completa.

Demostración. Primero veamos que μ_Γ es medida.

1. $\mu_\Gamma(\emptyset) := \sum_{b \in \mathcal{B}} \mu_b(\emptyset \cap J_b) = \sum_{b \in \mathcal{B}} \mu_b(\emptyset) = 0$ (pues μ_b es medida para cada $b \in \mathcal{B}$).
2. Sea $\{U_n\}_{n=0}^\infty \subset \mathcal{L}_\Gamma$ una colección disjunta, se tiene que:

$$\begin{aligned} \mu_\Gamma \left(\biguplus_{n=0}^\infty U_n \right) &\stackrel{\text{def}}{=} \sum_{b \in \mathcal{B}} \mu_b \left(\left(\biguplus_{n=0}^\infty U_n \right) \cap J_b \right) \\ &= \sum_{b \in \mathcal{B}} \mu_b \left(\biguplus_{n=0}^\infty (U_n \cap J_b) \right) \\ (\text{Cada } \mu_b \text{ es medida}) &= \sum_{b \in \mathcal{B}} \sum_{n=0}^\infty \mu_b(U_n \cap J_b) \\ (\mathcal{B} \text{ es numerable y los sumandos no negativos}) &= \sum_{n=0}^\infty \sum_{b \in \mathcal{B}} \mu_b(U_n \cap J_b) \\ &\stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=0}^\infty \mu_\Gamma(U_n) \end{aligned}$$

Entonces μ_Γ es una medida. Para ver que es completa, sea $N \in \mathcal{L}_\Gamma$ tal que $\mu_\Gamma(N) = 0$ y tomemos $F \subset N$. Por definición de μ_Γ tenemos que $\mu_b(N \cap J_b) = 0$ para toda $b \in \mathcal{B}$. Notemos que $F \cap J_b \subset N \cap J_b$ y que por ser φ_b biyectiva, se tiene $\varphi_b^{-1}(F \cap J_b) \subset \varphi_b^{-1}(N \cap J_b)$, además:

$$\lambda(\varphi_b^{-1}(N \cap J_b)) \stackrel{\text{def}}{=} \mu_b(N \cap J_b) = 0 \xrightarrow{\text{Completez de } \lambda} \lambda(\varphi_b^{-1}(F \cap J_b)) = 0.$$

Entonces $\mu_b(F \cap J_b) := \lambda(\varphi_b^{-1}(F \cap J_b)) = 0$, para cada $b \in \mathcal{B}$, luego

$$\mu_\Gamma(F) = \sum_{b \in \mathcal{B}} \mu_b(F \cap J_b) = 0,$$

esto para cada $F \subset N$.

$\therefore \mu_\Gamma$ es una medida completa. **Q.E.D.**

Ahora veamos una caracterización de las funciones medibles e integrables con base en las inyecciones canónicas $\{\varphi_b\}_{b \in \mathcal{B}}$.

Teorema 18. Una función $f : \Gamma_{met} \rightarrow \mathbb{C}$ es μ_Γ -medible si y sólo si, para cada $b \in \mathcal{B}$, $f|_{J_b} \circ \varphi_b$ es λ -medible. Más aún, $f \in L^1(\Gamma_{met}, \mathcal{L}_\Gamma, \mu_\Gamma)$ si y sólo si, para cada $b \in \mathcal{B}$, $f|_{J_b} \circ \varphi_b \in L^1([0, \ell(b)], \mathcal{L}_{[0, \ell(b)]}, \lambda)$ y se cumple la condición:

$$\sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} |f|_{J_b} \circ \varphi_b |d\lambda < +\infty, \quad (2.22)$$

en cuyo caso

$$\int_\Gamma f d\mu_\Gamma = \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} |f|_{J_b} \circ \varphi_b |d\lambda. \quad (2.23)$$

Demostración. La demostración para la medibilidad es análoga a la del teorema 15 para la continuidad. Para la integrabilidad, denotamos para cada $b \in \mathcal{B}$, la correspondiente arista métrica abierta por J_b° (que es la arista J_b sin sus vértices extremos).

Observemos que $\Gamma_{met} = (\bigsqcup_{b \in \mathcal{B}} J_b^\circ) \sqcup \mathcal{V}_{met}$, y que para $\tilde{v} \in \mathcal{V}$, y $b \in \mathcal{B}_v$, se tiene que $\mu_b(\tilde{v}) = 0$, luego:

$$\mu_\Gamma(\mathcal{V}_{met}) = \sum_{b \in \mathcal{B}} \mu_b(\mathcal{V}_{met} \cap J_b) = \sum_{b \in \mathcal{B}} (\mu_b(\{o(\tilde{b})\}) + \mu_b(\{t(\tilde{b})\})) = 0.$$

Así, \mathcal{V}_{met} es nulo, con lo cual:

$$\begin{aligned} \int_\Gamma |f| d\mu_\Gamma &= \int_{\bigsqcup_{b \in \mathcal{B}} J_b^\circ} |f| d\mu_\Gamma \\ &= \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_{J_b^\circ} |f| d\mu_\Gamma \\ (\mu_\Gamma(\{o(\tilde{b}), t(\tilde{b})\}) = 0) &= \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_{J_b} |f|_{J_b} |d\mu_\Gamma \end{aligned}$$

Ahora, utilizando la fórmula (2.20) tenemos:

$$\int_\Gamma f d\mu_\Gamma = \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} |f|_{J_b} \circ \varphi_b |d\lambda.$$

De este modo, $f \in L^1(\Gamma_{met}, \mathcal{L}_\Gamma, \mu_\Gamma)$ si y sólo si, para cada $b \in \mathcal{B}$, $f|_{J_b} \circ \varphi_b \in L^1([0, \ell(b)], \mathcal{L}_{[0, \ell(b)]}, \lambda)$ y se cumple la fórmula (2.22). **Q.E.D.**

Una consecuencia importante es la siguiente: consideremos una colección de funciones $g = (g_b)_{b \in \mathcal{B}} \in \prod_{b \in \mathcal{B}} L^1[0, \ell(b)]$ (a partir de aquí denotaremos $L^1[0, \ell(b)] := L^1([0, \ell(b)], \mathcal{L}_{[0, \ell(b)]}, \lambda)$) tales que satisfacen la condición $\sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} |g_b(x)| dx < \infty$ (de igual forma, denotaremos $dx = d\lambda$). Definimos la familia auxiliar $g^* = (g_b^*)_{b \in \mathcal{B}}$ dada por:

$$g_b^*(x) = \begin{cases} g_b(x), & \text{si } 0 < x < \ell(b) \\ 0, & \text{si } x \in \{0, \ell(b)\}, \end{cases}$$

de tal forma que $\int_0^{\ell(b)} |g_b(x)| dx = \int_0^{\ell(b)} |g_b^*(x)| dx$ y g^* cumpla la condición de continuidad en los vértices (2.15). Entonces g define una función en Γ dada por:

$$\hat{g}((b, x)^\sim) := (g_b^* \circ \varphi_b^{-1})((b, x)^\sim), \quad \text{para } (b, x)^\sim \in J_b.$$

Luego, por la condición (2.22) del teorema 18, $\hat{g} \in L^1(\Gamma_{met}, \mathcal{L}_\Gamma, \mu_\Gamma)$. De este modo, el problema de integrar sobre Γ_{met} se reduce a considerar familias de funciones integrables en los intervalos $[0, \ell(b)]$ que satisfagan la condición de finitud (2.22).

2.4. Diferenciación en grafos métricos

El último tema que falta por analizar es el de las funciones diferenciables. Como es de esperar, esto se hará vía las inyecciones canónicas $\{\varphi_b\}_{b \in \mathcal{B}}$. Por ello, empezaremos definiendo el concepto para aristas métricas.

Definición 28. Una función $f : \Gamma_{met} \rightarrow \mathbb{C}$ se dice que es de **clase C^1** en J_b (denotado $f \in C^1(J_b)$), si la función $f|_{J_b} \circ \varphi_b \in C^1[0, \ell(b)]$, en cuyo caso se define la derivada de f en el punto $(b, x)^\sim \in J_b$ como:

$$f'((b, x)^\sim) := \frac{d}{dx} \left(f|_{J_b} \circ \varphi_b(x) \right) \Big|_{x=\varphi_b^{-1}((b, x)^\sim)}. \quad (2.24)$$

Nota. En la fórmula (2.24), cuando $(b, x)^\sim$ es un vértice métrico, se toma la derivada por la derecha (si $\varphi_b^{-1}((b, x)^\sim) = 0$) ó por la izquierda (si $\varphi_b^{-1}((b, x)^\sim) = \ell(b)$) de $f|_{J_b} \circ \varphi_b$.

Ahora el problema es cómo definir una *función diferenciable* en todo el grafo Γ . Por supuesto, se puede decir que una función $f : \Gamma_{met} \rightarrow \mathbb{C}$ es diferenciable (o incluso de clase C^1) en $\Gamma_{met} \setminus \mathcal{V}_{met}$, si para toda $b \in \mathcal{B}$ la composición $f|_{J_b} \circ \varphi_b : [0, \ell(b)] \rightarrow \mathbb{C}$ es diferenciable (clase C^1) en $(0, \ell(b))$.

Podemos ver entonces que el problema se encuentra en los vértices, pues la “derivada” f' podría no ser una función. (De hecho, algunas veces los vértices son considerados como “singularidades”, y Γ_{met} se considera como una “variedad singular”).

Ejemplo 2. Considere el grafo $\Gamma = (\{v_1, v_2, v_3\}, \{b_1, b_2\})$, cuyas aristas tienen longitud $\ell(b_1) = \ell(b_2) = 1$ y están dirigidas del vértice v_1 a los vértices v_2, v_3 , como se aprecia en la figura 2.3.

Consideremos el par de funciones $f = (\cos(x), 1 + x)$ definidas ambas para $x \in [0, 1]$. Notamos que ambas funciones coinciden en $x = 0$, con lo cual el par f satisface la condición de continuidad en v_1 . Entonces, por el teorema 16, f define una función \tilde{f} continua en Γ_{met} . Además, como cada componente es de clase C^1 en $[0, 1]$, la función \tilde{f} es de clase C^1 en J_{b_1} y J_{b_2} , y además en $\Gamma_{met} \setminus \{\tilde{v}_1, \tilde{v}_2, \tilde{v}_3\}$.

No obstante, notemos que la “derivada” $f' = (-\sin(x), 1)$ no satisface la condición de continuidad en v_1 , pues $f'(v_1) = (0, 1)$. Entonces f' no define una función en todo Γ_{met} .

¿Cómo resolver el problema con f' ? Una primera opción sería imponer en la definición que f' satisfaga la condición de continuidad en cada vértice, y este procedimiento se puede hacer con las derivadas de orden superior. Sin embargo, en la práctica surge la necesidad de considerar familias de funciones cuyas derivadas no necesariamente satisfagan la condición de continuidad en los vértices, sino otro tipo de condiciones.

Tales condiciones surgen cuando se consideran *ecuaciones diferenciales* sobre Γ_{met} . Un problema típico podría ser, encontrar una familia de funciones $f = (f_b)_{b \in \mathcal{B}}$, tal que defina una función de clase C^2 en $\Gamma_{met} \setminus \mathcal{V}_{met}$ y que satisfaga:

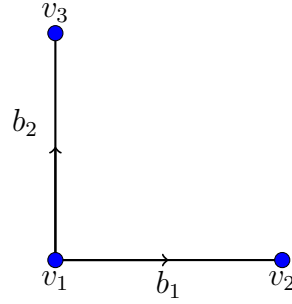


Figura 2.3: Grafo con 3 vértices

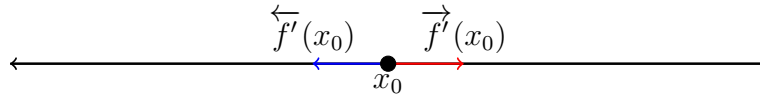


Figura 2.4: Derivadas direccionales en un punto.

1. $\tilde{f}''_b - q_b \tilde{f}'_b = 0$, en cada $b \in \mathcal{B}$, donde $q = (q_b)$ es una familia de funciones dada.
2. f' satisface alguna *condición de frontera* en los vértices.

Una de tales condiciones consiste en generalizar el siguiente hecho para las funciones definidas en algún intervalo $I \subset \mathbb{R}$: dada una función $f \in C^1(I)$ y un punto $x_0 \in I$, las *derivadas direccionales* de f en x_0 siempre satisfacen:

$$\overleftarrow{f}'(x_0) + \overrightarrow{f}'(x_0) = -f'(x_0) + f'(x_0) = 0$$

(esto se ilustra en la figura 2.4).

Ahora, si tomamos un vértice v y consideramos las aristas adyacente b_1, \dots, b_d con diferentes direcciones, podemos tomar la derivada de cada función f_1, \dots, f_d (definidas en los intervalos $[0, \ell(b_i)]$, $i = \overline{1, d}$) en el punto v como su *derivada direccional*. Por ejemplo, si v es el vértice inicial de b_i , podemos tomar $f'_{b_i}(v) := f'(0)$ (ya que v corresponde con la clase $(b_i, 0)^\sim \in \Gamma_{met}$). Por otro lado, si v es el vértice terminal de b_i (v corresponde a $(b_i, \ell(b_i))^\sim$), ajustamos la derivada en la “dirección de salida” de v , i.e., $f'_{b_i}(v) := -f'_{b_i}(\ell(b_i))$. Entonces, de forma análoga al caso de un intervalo, se esperaría que:

$$\sum_{i=1}^d f'_{b_i}(v) = 0.$$

Esta condición recibe el nombre de *condición de Kirchhoff*. En la siguiente sección estudiaremos éste y otros tipos de condiciones en los vértices.

Comentarios y observaciones

Nuestra definición de grafo métrico está basada en la de [6, 20, 28, 5]. En algunos trabajos se suele prescindir de la función de longitud, requiriendo solamente al conjunto de vértices \mathcal{V} , una colección de intervalos $\mathcal{I} = \{[0, b_i]\}_{i \in I}$ y el par de funciones $o, t : I \rightarrow \mathcal{V}$.

Este enfoque puede ser encontrado en los trabajos [10, 25].

La construcción del espacio Γ_{met} , se basa en las ideas presentadas en [28]. Cabe recalcar que existen diversas formas de definir al conjunto Γ_{met} : por ejemplo, en [25] sólo se utiliza el coproducto de los intervalos $\{[0, \ell(b)]\}_{b \in \mathcal{B}}$, y el conjunto $\{b\} \times [0, \ell(b)]$ se une con sus correspondientes vértices $\{o(b), t(b)\}$ para formar un conjunto similar a las aristas métricas J_b que se trabajaron en esta sección.

La definición de la métrica d_Γ es similar a la presentada en [25]. Otras definiciones emplean sucesiones de vértices que conectan los puntos \tilde{x}, \tilde{y} cuya distancia será calculada (véase [28]), o bien, se utiliza cualquier curva que conecta ambos puntos (ver [23]). Por supuesto, el cálculo efectivo de la distancia $d_\Gamma(\tilde{x}, \tilde{y})$ para grafos finitos puede hacerse empleando, por ejemplo, el conocido algoritmo de Dijkstra.

Por último, cabe mencionar que en ocasiones se suele prescindir del espacio Γ_{met} subyacente, y se trabaja únicamente con familias de funciones definidas en los intervalos $\{[0, \ell(b)]\}_{b \in \mathcal{B}}$ que cumplan por ejemplo, con las condiciones de continuidad. También en muchos problemas prácticos se consideran grafos $\Gamma_{met} \subset \mathbb{R}^n$, y se emplea la métrica inducida (ver [22, 3]).

3

Operadores diferenciales sobre grafos métricos

El corazón de las matemáticas son sus propios problemas.

Paul Halmos (1916–2006)

Sea $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{B})$ un grafo métrico, equipado con su función de longitud $\ell : \mathcal{B} \rightarrow [0, +\infty)$. En el capítulo anterior construimos el espacio métrico subyacente Γ_{met} y demostramos que el análisis de cualquier función continua o integrable $f : \Gamma_{met} \rightarrow \mathbb{C}$ puede ser reducido al estudio de familias de funciones $(f_b)_{b \in \mathcal{B}}$ definidas cada una en el intervalo $[0, \ell(b)]$ correspondiente.

El desarrollo de la teoría de ecuaciones diferenciales sobre grafos se reducirá entonces al análisis de ciertos operadores definidos sobre espacios de familias de funciones $(f_b)_{b \in \mathcal{B}}$ que puedan ser “levantadas” a funciones “legítimas”. Para esto, a continuación se introducen algunos espacios de familias de funciones.

3.1. Sumas directas externas y espacios de familias de funciones

Definición 29. Sea $\{\mathcal{H}_i\}_{i \in I}$ una familia de espacios de Hilbert complejos. Se define la **suma directa (externa)** de $\{\mathcal{H}_i\}_{i \in I}$ como la colección:

$$\bigoplus_{i \in I} \mathcal{H}_i := \left\{ (x_i)_{i \in I} \in \prod_{i \in I} \mathcal{H}_i \mid \sum_{i \in I} \|x_i\|_i^2 < +\infty \right\}, \quad (3.1)$$

donde la suma y el producto por escalar para dos elementos $(x_i), (y_i) \in \bigoplus_{i \in I} \mathcal{H}_i$ está definida como:

$$\alpha(x_i) + (y_i) := (\alpha x_i + y_i), \quad \alpha \in \mathbb{C}, \quad (3.2)$$

el producto interno está definido por:

$$\langle (x_i), (y_i) \rangle_{\bigoplus_{i \in I} \mathcal{H}_i} := \sum_{i \in I} \langle x_i, y_i \rangle_i \quad (3.3)$$

y la norma de (x_i) se define como:

$$\|(x_i)\|_{\oplus_{i \in I} \mathcal{H}_i} := \left(\sum_{i \in I} \|x_i\|_i^2 \right)^{1/2}. \quad (3.4)$$

Cabe recalcar que en las fórmulas (3.3) y (3.4), $\langle \cdot, \cdot \rangle_i$ y $\|\cdot\|_i$ denotan, respectivamente, el producto interno y la norma en \mathcal{H}_i . Por simplicidad denotaremos $\mathcal{H} = \oplus_{i \in I} \mathcal{H}_i$.

Teorema 19. *Sea $\mathcal{H} = \oplus_{i \in I} \mathcal{H}_i$. Entonces \mathcal{H} es un espacio de Hilbert con el producto interno (3.3) y la norma inducida (3.4).*

Demostración. Es claro que con la suma y el producto por escalar (3.2) \mathcal{H} es un espacio vectorial complejo. Ahora, sean $(x_i), (y_i) \in \mathcal{H}$ y $J \subset I$ finito. Por la desigualdad de Cauchy-Schwarz se tiene que:

$$\sum_{i \in J} |\langle x_i, y_i \rangle_i| \leq \sum_{i \in J} \|x_i\|_i \|y_i\|_i \leq \left(\sum_{i \in J} \|x_i\|_i^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{i \in J} \|y_i\|_i^2 \right)^{1/2} \leq \|(x_i)\|_{\mathcal{H}} \|(y_i)\|_{\mathcal{H}}.$$

Como esto ocurre para cualquier $J \subset I$ finito, se cumple

$$\sum_{i \in I} |\langle x_i, y_i \rangle_i| := \sup \left\{ \sum_{i \in J} |\langle x_i, y_i \rangle_i| \mid J \subset I \text{ finito} \right\} \leq \|(x_i)\|_{\mathcal{H}} \|(y_i)\|_{\mathcal{H}} < +\infty.$$

Se sigue entonces que sólo existe una cantidad numerable de sumandos $\langle x_i, y_i \rangle_i \neq 0$, con lo cual $\langle (x_i), (y_i) \rangle_{\mathcal{H}} = \sum_{i \in J} \langle x_i, y_i \rangle_i$ puede ser escrita como una serie absolutamente convergente de dichos elementos no cero. Así, (3.3) está bien definido y es sencillo verificar que cumple las propiedades de un producto interno, además de que

$$\langle (x_i), (x_i) \rangle_{\mathcal{H}} = \sum_{i \in I} \langle x_i, x_i \rangle_i = \sum_{i \in I} \|x_i\|_i^2 = \|(x_i)\|_{\mathcal{H}}^2,$$

con lo cual la norma (3.4) es inducida por el producto interno (3.3).

Ahora sea $\{(x_i^{(n)})\}_{n=0}^{\infty}$ una sucesión de Cauchy en \mathcal{H} . Dado $\epsilon > 0$ existe $N \in \mathbb{N}$ tal que:

$$\|(x_i^{(n)}) - (x_i^{(m)})\|_{\mathcal{H}} := \left(\sum_{i \in I} \|x_i^{(n)} - x_i^{(m)}\|_i^2 \right)^{1/2} < \epsilon, \quad \forall m, n \geq N.$$

Esto implica que para cada $i \in I$, $\|x_i^{(n)} - x_i^{(m)}\|_i < \epsilon$, $\forall m, n \geq N$, con lo cual $\{x_i^{(n)}\}_{n=0}^{\infty} \subset \mathcal{H}_i$ es una sucesión de Cauchy, y al ser \mathcal{H}_i un espacio de Hilbert, existe $\xi_i \in \mathcal{H}_i$ tal que $x_i^{(n)} \rightarrow \xi_i, n \rightarrow \infty$ en \mathcal{H}_i .

Definamos entonces $\xi = (\xi_i)$ y veamos que $\xi \in \mathcal{H}$. Para esto, tomese $J \subset I$ finito, entonces:

$$\forall n, m \geq N \quad \sum_{i \in J} \|x_i^{(n)} - x_i^{(m)}\|_i^2 < \epsilon^2, \text{ y haciendo tender } m \rightarrow \infty \text{ se tiene que}$$

$$\forall n \geq N \quad \sum_{i \in J} \|x_i^{(n)} - \xi_i\|_i^2 \leq \epsilon^2.$$

Como esto ocurre para todo $J \subset I$ finito, se sigue que:

$$\forall n \geq N \quad \sum_{i \in I} \|x_i^{(n)} - \xi_i\|_i^2 \leq \epsilon^2.$$

En particular se tiene que $(x_i^{(N+1)}) - (\xi_i) \in \mathcal{H}$, con lo cual $(\xi_i) = (x_i^{(N+1)}) - [(x_i^{(N+1)}) - (\xi_i)] \in \mathcal{H}$.

Finalmente, la condición

$$\forall n \geq N \quad \sum_{i \in J} \|x_i^{(n)} - \xi_i\|_i^2 \leq \epsilon^2$$

puede ser re-escrita como

$$\forall n \geq N \quad \|(x_i^{(n)}) - (\xi_i)\|_{\mathcal{H}}^2 \leq \epsilon^2$$

esto es, que $(x_i^{(n)}) \rightarrow (\xi_i), n \rightarrow \infty$ en \mathcal{H} , con lo cual se concluye que \mathcal{H} es un espacio de Hilbert. **Q.E.D.**

Ahora veamos algunas propiedades importantes sobre las sumas directas de espacios de Hilbert.

Proposición 12. *Suponga que $\{D_i\}_{i \in I}$ es una colección de subespacios densos en $\{H_i\}_{i \in I}$, i.e., $\forall i \in I, \overline{D_i} = H_i$. Entonces el subespacio*

$$\mathcal{D} := \left\{ (d_i) \in \prod_{i \in I} D_i \mid \exists J \subset I \text{ finito} : \forall i \notin J \ d_i = 0 \right\} \quad (3.5)$$

es denso en la suma directa \mathcal{H} .

Demostración. Sean $(x_i) \in \mathcal{H}$ y $\epsilon > 0$, entonces existe $J \subset I$ finito no vacío tal que $\sum_{i \in I \setminus J} \|x_i\|_i^2 < \frac{\epsilon^2}{2}$ (pues $\sum_{i \in I} \|x_i\|_i^2 < \infty$).

Sea $N = \#J$. Por hipótesis, para cada $i \in J$ existe $d_j \in \mathcal{H}$ tal que $\|x_i - d_j\|_i < \frac{\epsilon}{\sqrt{2N}}$.

Definamos ahora $(\hat{d}_i) \in \mathcal{D}$ como:

$$\hat{d}_i := \begin{cases} d_i, & \text{si } i \in J, \\ 0, & \text{otro caso.} \end{cases}$$

Se tiene que:

$$\|(x_i) - (\hat{d}_i)\|_{\mathcal{H}}^2 = \sum_{i \in I} \|x_i - \hat{d}_i\|_i^2 = \sum_{i \in J} \|x_i - d_i\|_i^2 + \sum_{i \in I \setminus J} \|x_i\|_i^2 < N \cdot \frac{\epsilon^2}{2N} + \frac{\epsilon^2}{2} = \epsilon^2.$$

Así, para cualesquiera $(x_i) \in \mathcal{H}$ y $\epsilon > 0$, existe $(\hat{d}_i) \in \mathcal{D}$ tal que $\|(x_i) - (\hat{d}_i)\|_{\mathcal{H}} < \epsilon$.
 $\therefore \overline{\mathcal{D}}^{\mathcal{H}} = \mathcal{H}$. **Q.E.D.**

Corolario 3. *Si $\{\mathcal{H}_i\}_{i \in I}$ es una familia contable de espacios de Hilbert separables, entonces su suma directa $\mathcal{H} = \bigoplus_{i \in I} \mathcal{H}_i$ es separable.*

Demostración. Para cada $i \in I$, sea D_i un subconjunto denso numerable en \mathcal{H}_i y definamos \mathcal{D} a partir de $\{D_i\}_{i \in I}$ como en (3.5). Por hipótesis, el conjunto de índices I es contable. Tomando $I = \{i_n\}_{n=1}^{\#I}$ una enumeración de I , el conjunto \mathcal{D} es equipotente con la colección

$$\bigcup_{m=1}^{\#I} \left\{ (x_n) \in \prod_{n=1}^{\#I} D_{i_n} \mid x_n = 0, \text{ para } n \geq m \right\},$$

la cual claramente es contable, por lo cual \mathcal{D} también lo es, y por la proposición anterior este conjunto es denso en \mathcal{H} , de modo que la suma directa es separable. **Q.E.D.**

Ahora consideramos algunos aspectos sobre los operadores que actúan sobre las sumas directas. Si $(A_i : \mathcal{D}(A_i) \subset \mathcal{H}_i \rightarrow \mathcal{H}_i)_{i \in I}$ es una colección de operadores (no necesariamente acotados), entonces se puede definir la “suma directa ¹” de tales operadores como el operador $A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ con dominio $\mathcal{D}(A) = \bigoplus_{i \in I} \mathcal{D}(A_i)$ y cuya acción está dada por

$$A(x_i) := (A_i x_i), \quad (x_i) \in \mathcal{H}.$$

(Por supuesto, podría definirse el operador A sobre un dominio más restringido). Un caso importante es cuando el conjunto de índices I es finito, porque entonces el operador suma directa preserva muchas propiedades de los operadores involucrados. El siguiente lema establece algunas de estas propiedades.

Lema 4. Sean $\{\mathcal{H}_i\}_{i=1}^n$ espacios de Hilbert complejos y $\mathcal{H} = \bigoplus_{i=1}^n \mathcal{H}_i$. Sean $A_i \in \mathcal{K}(\mathcal{H}_i)$, $i = \overline{1, n}$. Entonces el operador suma directa $A = \bigoplus_{i=1}^n A_i \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$.

Demostración. Sea $\{(x_1^{(m)}, \dots, x_n^{(m)})\}_{m=0}^{\infty} \subset \mathcal{H}$ una sucesión acotada. Entonces, para cada $i = \overline{1, n}$, la sucesión $\{x_i^{(m)}\}_{m=0}^{\infty} \subset \mathcal{H}_i$ es acotada.

Tomemos $i = 1$, como A_1 es compacto, existe una subsucesión $\{x_1^{(m_k)}\}_{k=0}^{\infty}$ tal que $\{A_1 x_1^{(m_k)}\}_{k=0}^{\infty}$ converge en \mathcal{H}_1 .

Ahora, consideramos la subsucesión $\{x_2^{(m_k)}\}_{k=0}^{\infty} \subset \{x_2^{(m)}\}_{m=0}^{\infty}$, la cual es acotada, y como A_2 es compacto, existe una subsucesión $\{x_2^{(m_{k_2})}\}_{k_2=0}^{\infty} \subset \{x_2^{(m_k)}\}_{k=0}^{\infty}$ tal que $\{A_2 x_2^{(m_{k_2})}\}_{k_2=0}^{\infty}$ converge en \mathcal{H}_2 . Más aún, notemos que $\{A_1 x_1^{(m_{k_2})}\}_{k_2=0}^{\infty} \subset \{A_1 x_1^{(m_k)}\}_{k=0}^{\infty}$, con lo cual $\{A_1 x_1^{(m_{k_2})}\}_{k_2=0}^{\infty}$ también converge en \mathcal{H}_1 .

Continuando este proceso diagonal hasta $i = n$, obtenemos una subsucesión $\{(x_1^{(m_j)}, \dots, x_n^{(m_j)})\}_{j=0}^{\infty}$ tal que $\{A_i x_i^{(m_j)}\}_{j=0}^{\infty}$ converge en \mathcal{H}_i , $i = \overline{1, n}$, y por ende son sucesiones de Cauchy.

Entonces:

$$\begin{aligned} \lim_{j, k \rightarrow \infty} \|A(x_1^{(m_j)}, \dots, x_n^{(m_j)}) - A(x_1^{(m_k)}, \dots, x_n^{(m_k)})\|_{\mathcal{H}}^2 &= \lim_{j, k \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \|A_i x_i^{(m_j)} - A_i x_i^{(m_k)}\|_i^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \lim_{j, k \rightarrow \infty} \|A_i x_i^{(m_j)} - A_i x_i^{(m_k)}\|_i^2 \\ (\text{Por ser cada sumando suc. de Cauchy}) &= 0 \end{aligned}$$

¹En realidad esta definición de suma directa de operadores no es estandar, y puede variar dependiendo de las propiedades de los operadores A_i

Así, la sucesión $\{A(x_1^{(m_j)}, \dots, x_n^{(m_j)})\}_{j=0}^\infty$ es de Cauchy en \mathcal{H} , el cual es completo con lo cual dicha sucesión converge. Entonces toda sucesión acotada es transformada por A en una sucesión que contiene una subsucesión convergente, luego A es compacto en \mathcal{H} . **Q.E.D.**

Nota. Hasta el momento hemos considerado la suma directa externa de espacios de Hilbert, y los hemos dotado de un producto interno con el cual se convierte también en un espacio de Hilbert. Sin embargo, es posible definir el concepto de suma directa para espacios de Banach.

Sea $\{X_i\}_{i \in I}$ una colección de espacios de Banach complejos, se define su suma directa externa como:

$$X = \bigoplus_{i \in I} X_i := \left\{ (x_i) \in \prod_{i \in I} X_i \mid \sup_{i \in I} \|x_i\|_i < +\infty \right\}. \quad (3.6)$$

El espacio X con la norma

$$\|(x_i)\|_{i \in I} := \sup_{i \in I} \|x_i\|_i, \quad (x_i) \in X, \quad (3.7)$$

es un espacio de Banach (la prueba es similar a la del caso para espacios de Hilbert). Es importante mencionar que la norma (3.7) no es la única que se puede definir en X , de hecho también se puede emplear la norma (3.4), pero ésta no necesariamente provendrá de un producto interno. Por supuesto, ambas normas producirán en general, espacios normados diferentes (aunque si el conjunto de índices I es finito serán equivalentes).

Es necesario establecer bajo que contexto se definirán las sumas directas. Cuando se hable de *suma directa de espacios de Hilbert*, se empleará la norma (3.4), y cuando se trabaje con *espacios de Banach*, la norma a utilizar será (3.7).

Ahora procedemos a definir los “espacios de funciones” sobre nuestros grafos métricos.

Definición 30. Sea $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{B})$ un grafo métrico con función de longitud $\ell : \mathcal{B} \rightarrow [0, +\infty)$. Se definen los siguientes espacios de familias de funciones:

(i) El espacio $L^2(\Gamma)$ como:

$$L^2(\Gamma) := \bigoplus_{b \in \mathcal{B}} L^2[0, \ell(b)]. \quad (3.8)$$

(ii) El espacio $L^\infty(\Gamma)$ como:

$$L^\infty(\Gamma) := \bigoplus_{b \in \mathcal{B}} L^\infty[0, \ell(b)]. \quad (3.9)$$

(iii) El espacio de **Sobolev de orden** $k \in \mathbb{N}$ como:

$$H^k(\Gamma) := \bigoplus_{b \in \mathcal{B}} H^k(0, \ell(b)). \quad (3.10)$$

Observación 3. De la definición anterior se deducen los siguientes hechos:

(i) El espacio $L^\infty(\Gamma)$ es un espacio de Banach con la norma $\|f\|_{L^\infty(\Gamma)} := \sup_{b \in \mathcal{B}} \|f_b\|_{L^\infty[0, \ell(b)]}$, para $f = (f_b) \in L^\infty(\Gamma)$, mientras que los espacios $L^2(\Gamma)$ y de Sobolev $H^k(\Gamma)$ son de Hilbert, con la norma y producto interno

$$\|f\|_{L^2(\Gamma)} := \left(\sum_{b \in \mathcal{B}} \|f_b\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 \right)^{1/2}, \quad \langle f, g \rangle_{L^2(\Gamma)} := \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} f_b(x) \overline{g_b(x)} dx, \quad (3.11)$$

para $f = (f_b), g = (g_b) \in L^2(\Gamma)$, y

$$\|u\|_{H^k(\Gamma)} := \left(\sum_{b \in \mathcal{B}} \|u_b\|_{H^k(0, \ell(b))}^2 \right)^{1/2} = \left(\sum_{b \in \mathcal{B}} \sum_{j=1}^k \|u_b^{(j)}\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 \right)^{1/2}, \quad (3.12)$$

$$\langle u, v \rangle_{H^k(\Gamma)} := \sum_{b \in \mathcal{B}} \langle u_b, v_b \rangle_{H^k(0, \ell(b))} = \sum_{b \in \mathcal{B}} \sum_{j=1}^k \int_0^{\ell(b)} u_b^{(j)}(x) \overline{v_b^{(j)}(x)} dx \quad (3.13)$$

para $u = (u_b), v = (v_b) \in H^k(\Gamma)$.

(ii) Para cada $b \in \mathcal{B}$, los espacios $L^2[0, \ell(b)]$ y $H^k(0, \ell(b))$ son separables (véase [7, cap]), y como \mathcal{B} es a lo más numerable, se sigue del corolario 3 que $L^2(\Gamma)$ y $H^k(\Gamma)$ son separables.

Notemos que si $f = (f_b) \in L^2(\Gamma)$, entonces define una clase $\hat{f} \in L^2(\Gamma_{met}, \mathcal{L}_\Gamma, \mu_\Gamma)$ bien definida casi en todo Γ , como se pudo ver en el capítulo anterior. De hecho, por el teorema 18, los espacios $L^2(\Gamma)$ y $L^2(\Gamma_{met}, \mathcal{L}_\Gamma, \mu_\Gamma)$ son isométricos.

Para el caso de los espacios de Sobolev se necesitan algunas consideraciones previas. A partir de aquí consideraremos el caso $k = 2$. Así, tomese $u = (u_b) \in H^2(\Gamma)$. Para cada $b \in \mathcal{B}$, los teoremas de encaje de Sobolev establecen que $H^2(0, \ell(b)) \hookrightarrow C^1[0, \ell(b)]$, de manera que cada clase $u_b \in H^2(0, \ell(b))$ admite un único representante continuo (véase [7, teorema 8.8]), de este modo, supondremos que $u_b \in C^1[0, \ell(b)]$ (aunque su segunda derivada podría existir sólo en el sentido distribucional). Definimos entonces:

$$u_b(0) := \lim_{x \rightarrow 0^+} u_b(x), \quad u_b(\ell(b)) := \lim_{x \rightarrow \ell(b)^-} u_b(x),$$

y los valores de la primera derivada:

$$u_b'(0) := \lim_{x \rightarrow 0^+} u_b'(x), \quad u_b'(\ell(b)) := \lim_{x \rightarrow \ell(b)^-} u_b'(x).$$

Procedemos entonces a definir los valores de u en los vértices.

Definición 31. Sean $u \in H^2(\Gamma)$ y $v \in \mathcal{V}$.

(i) Para cada $b \in \mathcal{B}_v$ se define el **valor** de u_b en el vértice v como:

$$u_b(v) := \begin{cases} u_b(0), & \text{si } v = o(b), \\ u_b(\ell(b)), & \text{si } v = t(b), \end{cases} \quad (3.14)$$

y el valor de la familia u en v como el vector:

$$\mathbf{u}(v) := (u_b(v))_{b \in \mathcal{B}_v} \in \mathbb{C}^{d_v}. \quad (3.15)$$

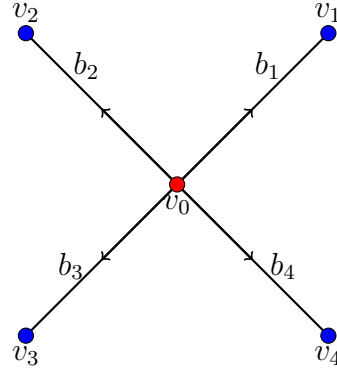


Figura 3.1: Grafo estrella con las aristas dirigidas hacia los vértices periféricos

(ii) Para cada $b \in \mathcal{B}_v$ se define la **derivada** de u_b en el vértice v como:

$$u'_b(v) := \begin{cases} u'_b(0), & \text{si } v = o(b), \\ -u'_b(\ell(b)), & \text{si } v = t(b), \end{cases} \quad (3.16)$$

y la derivada de la familia u en v como el vector:

$$\mathbf{u}'(v) := (u'_b(v))_{b \in \mathcal{B}_v} \in \mathbb{C}^{d_v}. \quad (3.17)$$

(iii) Diremos que la familia u satisface la *condición de continuidad* en v (o simplemente que es *continua* en v), si:

$$\forall b, c \in \mathcal{B}_v \quad u_b(v) = u_c(v),$$

en cuyo caso este valor común se denota simplemente $u(v)$.

(iv) Decimos que u satisface las **condiciones de Neumann -Kirchhoff** (abreviado N-K) en v , si u es continua en v y satisface la siguiente *condición de conservación de corriente*:

$$\sum_{b \in \mathcal{B}_v} u'_b(v) = 0. \quad (3.18)$$

Ejemplo 3. Consideremos un grafo estrella Γ con 4 vértices periféricos y 1 vértice central. Supongamos que las aristas están dirigidas del vértice central a los vértices periféricos, como puede verse en la figura 3.1.

Denotemos $\ell_i = \ell(b_i)$, $i = \overline{1, 4}$. Los espacios $L^2(\Gamma)$ y $H^2(\Gamma)$ son colecciones de 4-tuplas $u = (u_1, u_2, u_3, u_4)$ tales que $u_i \in L^2[0, \ell_i]$, $i = \overline{1, 4}$ si $u \in L^2(\Gamma)$, y $u_i \in H^2(0, \ell_i)$, $i = \overline{1, 4}$ en caso de que $u \in H^2(\Gamma)$. Un ejemplo típico de una de tales 4-tuplas sería $f = (\cos(x), x^2 + 1, 0, e^x) \in H^2(\Gamma)$.

La condición de continuidad para el grafo Γ en cada vértice está dada de la siguiente manera: para los vértices periféricos no hay necesidad de dicha condición, mientras que para el vértice central sería

$$u_1(\ell_1) = u_2(\ell_2) = u_3(\ell_3) = u_4(\ell_4).$$

Por otra parte, la condición de Kirchoff en los vértices periféricos está dada por

$$-u'_i(\ell_i) = 0,$$

mientras que en el vértice central es

$$u'_1(0) + u'_2(0) + u'_3(0) + u'_4(0) = 0.$$

Por ejemplo, sea $u \in H^2(\Gamma)$ dado por

$$u = \left(1, \cos\left(\frac{\pi}{\ell_2}x\right), 1, 1 \right).$$

En este caso $\mathbf{u}(v_1) = (1, 1, 1, 1)$, con lo cual se satisface la condición de continuidad, mientras que $u'_i(\ell_i) = u'_i(0) = 0$, $i = 1, 3, 4$, y $u'_2(0) = 0$, $u'_2(\ell_2) = -\frac{\pi}{\ell_2} \sin\left(\frac{\pi}{\ell_2}\ell_2\right) = 0$, de modo que la condición de Kirchoff en los vértices periféricos es satisfecha, así como la condición central $\sum_{i=1}^4 u'_i(0) = 0$. Entonces u satisface las condiciones de N-K.

Es importante recalcar algunas propiedades que poseen los valores en los vértices de una colección $u \in H^2(\Gamma)$, ya que será necesario operar con las sumas de dichos valores mas adelante. Para esto ocuparemos el siguiente lema:

Lema 5. Sean $a > 0$ y $u \in H^1(0, a)$. Entonces para cualquier $0 < \ell \leq a$ se cumple:

$$|u(\xi)|^2 \leq \frac{2}{\ell} \|u\|_{L^2[0,a]}^2 + \ell \|u'\|_{L^2[0,a]}^2, \quad (3.19)$$

donde $\xi \in \{0, a\}$.

Demostración. Como $u \in H^1(0, a)$ y $\ell \leq a$, entonces $u \in H^1(0, \ell)$. Toda función en este espacio es absolutamente continua en $[0, \ell]$, y podemos escribir:

$$u(0) = u(x) - \int_0^x u'(t)dt, \quad \text{c.t.p. } x \in [0, \ell]$$

(para una prueba de este resultado, véase [7, cap. 8, teo. 8.2]). Estimamos esta integral empleando la desigualdad de Cauchy-Schwarz:

$$\left| \int_0^x u'(t)dt \right|^2 \leq \|u'\|_{L^2[0,a]}^2 \|\chi_{[0,x]}\|_{L^2[0,a]}^2 = x \|u'\|_{L^2[0,a]}^2$$

Esto implica que:

$$\left\| \int_0^x u'(t)dt \right\|_{L^2[0,\ell]}^2 \leq \|u'\|_{L^2[0,a]}^2 \int_0^\ell x dx = \frac{\ell^2}{2} \|u'\|_{L^2[0,a]}^2.$$

Luego:

$$\begin{aligned} \ell |u(0)|^2 &= \|u(0)\|_{L^2[0,\ell]}^2 \leq \left(\|u\|_{L^2[0,\ell]} + \left\| \int_0^x u'(t)dt \right\|_{L^2[0,\ell]} \right)^2 \\ ((a+b)^2 &\leq 2(a^2 + b^2)) \leq 2 \left(\|u\|_{L^2[0,\ell]}^2 + \left\| \int_0^x u'(t)dt \right\|_{L^2[0,\ell]}^2 \right) \\ &\leq 2 \|u\|_{L^2[0,a]}^2 + \ell^2 \|u'\|_{L^2[0,a]}^2. \end{aligned}$$

$$\therefore |u(0)|^2 \leq \frac{2}{\ell} \|u\|_{L^2(0,a)}^2 + \ell \|u'\|_{L^2(0,a)}^2.$$

Para $\xi = a$, consideremos la función $\psi(x) = u(a-x)$. En sencillo ver que $\psi \in H^1(0,a)$ y que $\|u^{(i)}\|_{L^2[0,a]} = \|\psi^{(i)}\|_{L^2[0,a]}$, para $i = 0, 1$. Entonces, aplicando la desigualdad anterior obtenemos que:

$$|u(a)|^2 = |\psi(0)|^2 \leq \frac{2}{\ell} \|\psi\|_{L^2[0,a]}^2 + \ell \|\psi'\|_{L^2[0,a]}^2 = \frac{2}{\ell} \|u\|_{L^2[0,a]}^2 + \ell \|u'\|_{L^2[0,a]}^2,$$

lo cual prueba la desigualdad para $\xi = a$. **Q.E.D.**

Recordemos ahora que, por la hipótesis 3, existe una cota inferior ℓ_0 para las longitudes de las aristas del grafo Γ . Empleando esta cota, se tiene la siguiente proposición.

Proposición 13. *Existe una constante $C_{\ell_0} > 0$ que sólo depende de ℓ_0 , tal que para cualquier $u \in H^2(\Gamma)$ se cumple:*

$$\sum_{b \in \mathcal{B}} |u_b^{(j)}(v_b)|^2 \leq C_{\ell_0} \|u\|_{H^2(\Gamma)}^2, \quad (3.20)$$

donde $v_b \in \{o(b), t(b)\}$, $j = 0, 1$.

Demostración. Para cada $b \in \mathcal{B}$, $\ell_0 \leq \ell(b)$ y $u_b \in H^2(0, \ell(b))$. Tómese $v_b \in \{o(b), t(b)\}$, entonces $u(v_b) = u(\xi)$, para algún $\xi \in \{0, \ell(b)\}$. Por el lema 5 tenemos:

$$|u(v_b)|^2 = |u_b(\xi)|^2 \leq \frac{2}{\ell_0} \|u\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 + \ell_0 \|u'\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 \leq \max \left\{ \frac{2}{\ell_0}, \ell_0 \right\} \left(\|u\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 + \|u'\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 \right).$$

Tomando $C_{\ell_0} := \max \left\{ \frac{2}{\ell_0}, \ell_0 \right\}$ se tiene:

$$|u_b(v_b)|^2 \leq C_{\ell_0} \left(\|u\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 + \|u'\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 \right) \leq C_{\ell_0} \|u\|_{H^2(0, \ell(b))}^2,$$

luego

$$\sum_{b \in \mathcal{B}} |u_b(v_b)|^2 \leq \sum_{b \in \mathcal{B}} C_{\ell_0} \|u\|_{H^2(0, \ell(b))}^2 = C_{\ell_0} \|u\|_{H^2(\Gamma)}^2.$$

Para el caso de la derivada, observamos que $u'_b \in H^1(0, \ell(b))$, por lo cual aplicando el lema 5 se tiene

$$|u'_b(v_b)|^2 \leq \frac{2}{\ell_0} \|u'\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 + \ell_0 \|u''\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2$$

y procedemos como antes para obtener la desigualdad (3.20). **Q.E.D.**

La principal consecuencia de la desigualdad (3.20), es que la suma de los cuadrados de los valores de una familia $u \in H^2(\Gamma)$, en un vértice inicial o terminal de una arista, o de su derivada, convergen absolutamente, i.e., pertenecen al espacio $\ell^2(\mathcal{B})$. Entonces, para $u, v \in H^2(\Gamma)$, las sumas de la forma

$$\sum_{b \in \mathcal{B}} u_b^{(i)}(v_b) \overline{v_b^{(j)}(w_b)}, \quad v_b, w_b \in \{o(b), t(b)\}, \quad i, j \in \{0, 1\}$$

convergen absolutamente, de modo que podemos reordenarlas sin problema alguno.

3.2. Operadores diferenciales sobre grafos cuánticos

Un grafo métrico se convierte en un *grafo cuántico* cuando es dotado de una estructura adicional: se le asigna un operador diferencial. Tal operador suele llamarse en la literatura estándar como *hamiltoniano*. En muchos casos se requiere que el hamiltoniano sea un operador autoadjunto.

En el estudio de los grafos cuánticos el operador más frecuente es menos la segunda derivada actuando en cada arista: $f(x) \mapsto -\frac{d^2}{dx^2}f(x)$ (por supuesto, x denota un punto en algún intervalo $(0, \ell(b))$). De manera más general se consideran operadores de tipo Schrödinger $f(x) \mapsto -\frac{d^2}{dx^2}f(x) + V(x)f(x)$, donde V es un potencial eléctrico. Notemos que en estos operadores la dirección de las aristas es irrelevante, no obstante, esto no ocurre si se busca incluir términos donde aparezca la primera derivada .

Sin embargo, la definición de un hamiltoniano no esta completa si no se describe su dominio. De forma análoga a la que un operador diferencial en un intervalo $[a, b]$ presenta condiciones en los extremos, para un hamiltoniano en un grafo cuántico las condiciones se dan en los vértices.

Definición 32. Un **grafo cuántico**, es un grafo métrico equipado con un operador diferencial \mathcal{H} llamado **hamiltoniano**, acompañado de condiciones en los vértices, i.e. es una tripleta:

$$(\text{Grafo métrico } \Gamma, \text{ Hamiltoniano } \mathcal{H}, \text{ Condiciones en los vértices}).$$

Ahora veamos la definición formal del hamiltoniano dado por el operador de Schrödinger.

Definición 33. Sea $q \in L^\infty(\Gamma)$ una familia de funciones de valor real. Definimos el **operador de Schrödinger** con potencial q sobre el grafo Γ , como el operador $\mathcal{H}_q : \mathcal{D}(\mathcal{H}_q) \subset L^2(\Gamma) \rightarrow L^2(\Gamma)$ cuya acción está dada por:

$$\mathcal{H}_q u := (-u_b'' + q_b(x)u_b)_{b \in \mathcal{B}}, \quad (3.21)$$

con dominio

$$\mathcal{D}(\mathcal{H}_q) := \{u \in L^2(\Gamma) \mid \forall v \in \mathcal{V}, u \text{ satisface las condiciones de N-K en } v\}. \quad (3.22)$$

Como en este capítulo trabajaremos con un potencial q fijo, denotaremos el hamiltoniano simplemente por \mathcal{H} .

Como un comentario importante, cabe recalcar que esta no es la única forma de introducir el operador de Schrödinger. Se pudo definir el operador \mathcal{H}_1 de la misma manera que en (3.21), pero con dominio $\bigoplus_{b \in \mathcal{B}} C_0^\infty(0, \ell(b))$. Resulta que tal operador es clausurable y su clausura $\overline{\mathcal{H}_1}$ es un operador que actúa como (3.21), pero con dominio $\bigoplus_{b \in \mathcal{B}} H_0^2(0, \ell(b))$, donde $H^2(0, \ell(b)) := \{u \in H^2(0, \ell(b)) \mid u_b(0) = u_b(\ell(b)) = 0\}$ (la demostración de este hecho puede consultarse en el capítulo 1 de [6]).

El operador clausura resulta ser autoadjunto, con lo cual \mathcal{H}_1 es esencialmente autoadjunto, sin embargo es importante notar que aunque los 3 operadores actúan de la misma manera, sus dominios son distintos, de modo que se trata de operadores diferentes. De hecho, $\mathcal{H}_1 \subset \mathcal{H}$, pero \mathcal{H} y $\overline{\mathcal{H}_1}$ no son comparables.

Ahora analicemos algunas propiedades del hamiltoniano \mathcal{H} .

Proposición 14. *El hamiltoniano \mathcal{H} definido por (3.21) con dominio (3.22), es un operador simétrico densamente definido en $L^2(\Gamma)$.*

Demostración. Para ver que $\overline{\mathcal{D}(\mathcal{H})}^{L^2(\Gamma)} = L^2(\Gamma)$, notamos que

$$\mathcal{D} := \left\{ (\varphi_b) \in \bigoplus_{b \in \mathcal{B}} C_0^\infty(0, \ell(b)) \mid \exists J \subset \mathcal{B} \text{ finito} : \forall b \notin J \varphi_b \equiv 0 \right\} \subset \mathcal{D}(\mathcal{H}),$$

y como para cada $b \in \mathcal{B}$ se cumple que $\overline{C_0^\infty(0, \ell(b))}^{L^2[0, \ell(b)]} = L^2[0, \ell(b)]$, se sigue de la proposición 12 que $\overline{\mathcal{D}}^{L^2(\Gamma)} = L^2(\Gamma)$, luego $\overline{\mathcal{D}(\mathcal{H})}^{L^2(\Gamma)} \supset \overline{\mathcal{D}}^{L^2(\Gamma)} = L^2(\Gamma)$.

$\therefore \mathcal{H}$ está densamente definido en $L^2(\Gamma)$.

Para la simetría, considere $u, w \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$, se tiene que:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H}u, w \rangle_{L^2(\Gamma)} &\stackrel{\text{Def}}{=} \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} [-u_b'' \overline{w_b} + q_b \overline{w_b}] dx \\ (q_b \text{ es real}) &= \sum_{b \in \mathcal{B}} \left\{ [-u_b' \overline{w_b} + u_b \overline{w_b'}]_0^{\ell(b)} + \int_0^{\ell(b)} [u \overline{(-w_b'')} + u_b q_b \overline{w_b}] dx \right\} \\ &= \sum_{b \in \mathcal{B}} [-u_b' \overline{w_b} + u_b \overline{w_b'}]_0^{\ell(b)} + \langle u, \mathcal{H}w \rangle_{L^2(\Gamma)}. \end{aligned}$$

Las sumas que aparecen en el miembro derecho de la ecuación convergen absolutamente, por lo cual podemos reordenarlas para obtener:

$$\begin{aligned} \sum_{b \in \mathcal{B}} -u_b' \overline{w_b} \Big|_0^{\ell(b)} &= \sum_{b \in \mathcal{B}} \left(-u_b'(\ell(b)) \overline{w_b(\ell(b))} + u_b'(0) \overline{w_b'(0)} \right) \\ \text{Def. (3.14) y (3.16)} &= \sum_{b \in \mathcal{B}} \left(u_b'(t(b)) \overline{w_b(t(b))} + u_b'(o(b)) \overline{w_b'(o(b))} \right) \\ &= \sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{b \in \mathcal{B}_v} u_b'(v) \overline{w_b(v)} \\ \text{Condición de continuidad} &= \sum_{v \in \mathcal{V}} \overline{w(v)} \left(\sum_{b \in \mathcal{B}_v} u_b'(v) \right) \\ \text{Condición (3.18)} &= 0. \end{aligned}$$

De forma análoga se prueba que $\sum_{b \in \mathcal{B}} u_b \overline{w_b'} \Big|_0^{\ell(b)} = 0$, luego $\langle \mathcal{H}u, w \rangle_{L^2(\Gamma)} = \langle u, \mathcal{H}w \rangle_{L^2(\Gamma)}$ para cualesquiera $u, w \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$, de modo que \mathcal{H} es simétrico. **Q.E.D.**

Al ser \mathcal{H} densamente definido, existe su adjunto $\mathcal{H}^* : \mathcal{D}(\mathcal{H}^*) \subset L^2(\Gamma) \rightarrow L^2(\Gamma)$ y por simetría $\mathcal{H} \subset \mathcal{H}^*$.

De momento nos concentraremos en el caso cuando $q \equiv 0$, i.e., cuando \mathcal{H} es simplemente el operador menos segunda derivada.

Hagamos una observación importante sobre el dominio $\mathcal{D}(\mathcal{H})$: tomemos $v \in \mathcal{V}$ tal que $d_v > 1$ (vértice interior) y $u \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$. Notemos que las condiciones de N-K pueden

escribirse en forma del siguiente sistema de $d_v \times d_v$ ecuaciones

$$\begin{aligned} u_1(v) &= u_2(v) \\ &\vdots \\ u_{d_v-1}(v) &= u_{d_v}(v) \\ u'_1(v) + \cdots + u'_{d_v}(v) &= 0, \end{aligned}$$

el cual puede ser escrito en forma matricial como

$$\mathbf{A}_v \mathbf{u}(v) + \mathbf{B}_v \mathbf{u}'(v) = \mathbf{0}, \quad (3.23)$$

donde $\mathbf{A}_v, \mathbf{B}_v \in \mathcal{M}_{d_v}(\mathbb{C})$ están dadas por:

$$\mathbf{A}_v := \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_v := \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Notamos que se cumple que la matriz aumentada $(\mathbf{A}_v | \mathbf{B}_v) \in \mathcal{M}_{d_v \times 2d_v}$ tiene *rango maximal* (i.e. $\text{rank}(\mathbf{A}_v | \mathbf{B}_v) = d_v$), y además

$$\mathbf{A}_v \mathbf{B}_v^* = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{0}_{d_v \times d_v},$$

con lo cual $\mathbf{A}_v^* \mathbf{B}_v = (\mathbf{A}_v \mathbf{B}_v^*)^* = \mathbf{0}_{d_v \times d_v}$.

Por otro lado, si $d_v = 1$ (vértice periférico) la condición de continuidad es irrelevante, mientras la condición de conservación de corriente es simplemente $u'_b(v) = 0$, donde b es la única arista adyacente a v . Entonces las matrices del caso anterior son $\mathbf{A}_v = 0$, $\mathbf{B}_v = 1$, y también se satisfacen las condiciones de maximalidad del rango y $\mathbf{A}_v^* \mathbf{B}_v = \mathbf{A}_v \mathbf{B}_v^* = 0$.

De esta forma el dominio $\mathcal{D}(\mathcal{H})$ puede ser reescrito como:

$$\mathcal{D}(\mathcal{H}) := \{u \in H^2(\Gamma) \mid \forall v \in \mathcal{V} \quad \mathbf{A}_v \mathbf{u}(v) + \mathbf{B}_v \mathbf{u}'(v) = \mathbf{0}\}. \quad (3.25)$$

Teorema 20. *El hamiltoniano $\mathcal{H} : \mathcal{D}(\mathcal{H}) \subset L^2(\Gamma) \rightarrow L^2(\Gamma)$ definido por $\mathcal{H}u := (-u''_b)$ con dominio (3.22) es autoadjunto.*

Demostración. Por las proposiciones 14 y 3, sólo hay que probar que $\mathcal{D}(\mathcal{H}^*) \subset \mathcal{D}(\mathcal{H})$. Sea $g \in \mathcal{D}(\mathcal{H}^*)$, entonces por definición del dominio del operador adjunto, existe $w \in L^2(\Gamma)$ tal que:

$$\forall u \in \mathcal{D}(\mathcal{H}) \quad \langle \mathcal{H}u, g \rangle_{L^2(\Gamma)} = \langle u, w \rangle_{L^2(\Gamma)}.$$

Tómese $b \in \mathcal{B}$ fijo y $\phi \in C_0^\infty(0, \ell(b))$ una función de prueba arbitraria. Definamos la siguiente colección de funciones (u_d) dada por:

$$u_d = \begin{cases} \phi, & \text{si } d = b, \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Claramente $u \in H^2(\Gamma)$ y se satisfacen trivialmente las condiciones de N-K. Ahora, de la definición de adjunto tenemos que $\langle \mathcal{H}u, g \rangle_{L^2(\Gamma)} = \langle u, w \rangle_{L^2(\Gamma)}$. Desarrollando el miembro izquierdo de esta ecuación se tiene:

$$\langle \mathcal{H}u, g \rangle_{L^2(\Gamma)} = \int_0^{\ell(b)} (-\phi'') \bar{g}_b dx,$$

mientras que el miembro derecho es:

$$\langle u, g \rangle_{L^2(\Gamma)} = \int_0^{\ell(b)} \phi \bar{w}_b dx.$$

$$\therefore \int_0^{\ell(b)} (-\phi'') \bar{g}_b dx = \int_0^{\ell(b)} \phi \bar{w}_b dx, \quad \forall \phi \in C_0^\infty(0, \ell(b)).$$

Se sigue de la definición de derivada generalizada que $g_b \in H^2(0, \ell(b))$ y $w_b = -g_b''$ (en el sentido débil). Como esto ocurre para toda $b \in \mathcal{B}$ se tiene que $w = \mathcal{H}g$.

Tenemos entonces la siguiente igualdad: $\langle \mathcal{H}u, g \rangle_{L^2(\Gamma)} = \langle u, \mathcal{H}g \rangle_{L^2(\Gamma)}$, $\forall u \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$.

Como $g_b \in H^2(0, \ell(b))$ para cada $b \in \mathcal{B}$, podemos definir $\mathbf{g}(v)$ y $\mathbf{g}'(v)$ en cada vértice v . Desarrollando el miembro izquierdo de la última igualdad y procediendo como en la demostración de la proposición 14 tenemos:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H}u, g \rangle_{L^2(\Gamma)} &= \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} (-u_b'') \bar{g}_b dx \\ &= \sum_{b \in \mathcal{B}} [-u_b' \bar{g}_b + u_b \bar{g}_b']_0^{\ell(b)} + \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} u_b (\overline{-g_b''}) dx \\ &= \sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{b \in \mathcal{E}_v} [u_b'(v) \bar{g}_b(v) - u_b(v) \bar{g}_b'(v)] + \langle u, \mathcal{H}g \rangle_{L^2(\Gamma)} \\ &= \sum_{v \in \mathcal{V}} [\langle \mathbf{u}'(v), \mathbf{g}(v) \rangle_v - \langle \mathbf{u}(v), \mathbf{g}'(v) \rangle_v] + \langle u, \mathcal{H}g \rangle_{L^2(\Gamma)} \end{aligned}$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle_v$ denota el producto interno usual en \mathbb{C}^{d_v} . Puesto que $\langle \mathcal{H}u, g \rangle_{L^2(\Gamma)} = \langle u, \mathcal{H}g \rangle_{L^2(\Gamma)}$ tenemos que:

$$\sum_{v \in \mathcal{V}} [\langle \mathbf{u}'(v), \mathbf{g}(v) \rangle_v - \langle \mathbf{u}(v), \mathbf{g}'(v) \rangle_v] = 0, \quad \forall u \in \mathcal{D}(\mathcal{H}).$$

Fijemos $v \in \mathcal{V}$ y denotemos $d = d_v$, $\mathbf{A} = \mathbf{A}_v$ y $\mathbf{B} = \mathbf{B}_v$ para simplificar notación. Tomemos $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^d$ arbitrario y escojamos $(u_1, \dots, u_d) \in \bigoplus_{i=1}^d H^2(0, \ell(b_i))$ (donde $\mathcal{E}_v = \{b_1, \dots, b_d\}$) tales que, $(u_1(v), \dots, u_d(v)) = -\mathbf{B}^* \mathbf{x}$, $(u_1'(v), \dots, u_d'(v)) = \mathbf{A}^* \mathbf{x}$ y

$u_j(w) = u'_j(w) = 0$, $j = \overline{1, d}$, para los vértices w adyacentes a v^2 .

Definamos ahora la colección $u = (u_b)$, donde:

$$u_b = \begin{cases} u_{b_j}, & \text{si } b = b_j \text{ para algún } j = \overline{1, d}, \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

De este modo, $u \in H^2(\Gamma)$ y $\mathbf{u} = \mathbf{u}(v) = -\mathbf{B}^* \mathbf{x}$ y $\mathbf{u}' = \mathbf{u}'(v) = \mathbf{A}^* \mathbf{x}$, con lo cual

$$\mathbf{A} \mathbf{u} + \mathbf{B} \mathbf{u}' = -\mathbf{A} \mathbf{B}^* \mathbf{x} + \mathbf{B} \mathbf{A}^* \mathbf{x} = (-\mathbf{A} \mathbf{B}^* + \mathbf{B} \mathbf{A}^*) \mathbf{x} = \mathbf{0}$$

(pues $\mathbf{A} \mathbf{B}^* = \mathbf{B} \mathbf{A}^*$), luego por la caracterización (3.25) se tiene que $u \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$. Como u y su derivada se anulan en todos los vértices distintos de v , la condición para g se transforma en

$$0 = \langle \mathbf{u}', \mathbf{g} \rangle - \langle \mathbf{u}, \mathbf{g}' \rangle = \langle \mathbf{A}^* \mathbf{x}, \mathbf{g} \rangle - \langle -\mathbf{B}^* \mathbf{x}, \mathbf{g}' \rangle = \langle \mathbf{x}, (\mathbf{A} \mathbf{g} + \mathbf{B} \mathbf{g}') \rangle.$$

Como esta construcción fue para \mathbf{x} arbitrario, tenemos que $\langle \mathbf{x}, (\mathbf{A} \mathbf{g} + \mathbf{B} \mathbf{g}') \rangle = 0$, para toda $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^d$, luego $\mathbf{A} \mathbf{g} + \mathbf{B} \mathbf{g}' = \mathbf{0}$.

Esto ocurre para cada vértice $v \in \mathcal{V}$, con lo cual g satisface las condiciones N-K.

Por último, tenemos que $g, g'' \in L^2(\Gamma)$, solo resta ver que $g' \in L^2(\Gamma)$. Para ello se emplea que g satisface las condiciones de N-K:

$$\begin{aligned} \|g'\|_{L^2(\Gamma)}^2 &= \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} g'_b \overline{g'_b} dx \\ &= \sum_{b \in \mathcal{B}} g_b \overline{g'_b} \Big|_0^{\ell(b)} - \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} g_b \overline{g''_b} dx \\ &= \sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{b \in \mathcal{B}_v} g_b(v) \overline{g'_b(v)} + \langle g, \mathcal{H}g \rangle_{L^2(\Gamma)} \\ \text{(Condición de continuidad)} &= \sum_{v \in \mathcal{V}} g(v) \overline{\left(\sum_{b \in \mathcal{E}_v} g'_b(v) \right)} + \langle g, \mathcal{H}g \rangle_{L^2(\Gamma)} \\ \text{(Condición de Kirchhoff)} &= 0 + \langle g, \mathcal{H}g \rangle_{L^2(\Gamma)}. \end{aligned}$$

Luego $\|g'\|_{L^2(\Gamma)} < \infty$ y

$$\|g\|_{H^2(\Gamma)} := \sum_{b \in \mathcal{B}} \|g_b\|_{H^2(0, \ell(b))}^2 = \sum_{b \in \mathcal{B}} \left(\|g_b\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 + \|g'_b\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 + \|g''_b\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 \right) < \infty.$$

$\therefore g \in H^2(\Gamma)$ y satisface las condiciones de N-K, i.e. $g \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$

Q.E.D.

Ahora regresamos al operador de Schrödinger $\mathcal{H} := -\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$ con un potencial de valor real. El siguiente lema será de gran utilidad.

²Explícitamente se requiere que, si $v = o(b_j)$, entonces $u_j(0) = -(\mathbf{B}^* \mathbf{x})_j$, $u'_j(0) = (\mathbf{A}^* \mathbf{x})_j$ y $u_j(\ell(b_j)) = u'_j(\ell(b_j)) = 0$, y de forma similar si $v = t(b_j)$. Por supuesto, siempre es posible construir una función $u_j \in H^2(0, \ell(b_j))$ que satisfaga estas condiciones

Lema 6. Sea \mathcal{H} espacio de Hilbert, $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido y $S \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Suponga que T y S son autoadjuntos. Entonces $T + S : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ es autoadjunto.

Nota. Cabe recalcar que aunque S sea acotado, en general $T + S$ no lo es.

Demostración. Primero veamos que $T + S$ es simétrico. En efecto, dados $x, y \in \mathcal{D}(T)$ se tiene:

$$\langle (T + S)x, y \rangle = \langle Tx, y \rangle + \langle Sx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle + \langle x, Sy \rangle = \langle x, (T + S)y \rangle,$$

pues T y S son autoadjuntos por hipótesis. Ahora, por la proposición 3 solo resta ver que $\mathcal{D}((T + S)^*) \subset \mathcal{D}(T + S) = \mathcal{D}(T)$. Sea $y \in \mathcal{D}((T + S)^*)$ y tómesese $x \in \mathcal{D}(T)$ arbitrario. Por definición de operador adjunto:

$$\langle (T + S)x, y \rangle = \langle x, (T + S)^*y \rangle.$$

Por otro lado, como S es un operador autoadjunto acotado,

$$\langle (T + S)x, y \rangle = \langle Tx, y \rangle + \langle Sx, y \rangle = \langle Tx, y \rangle + \langle x, Sy \rangle.$$

Combinando ambas ecuaciones tenemos que:

$$\langle x, (T + S)^*y \rangle = \langle Tx, y \rangle + \langle x, Sy \rangle \Rightarrow \langle Tx, y \rangle = \langle x, ((T + S)^* - S)y \rangle$$

$\therefore \forall x \in \mathcal{D}(T) \quad \langle Tx, y \rangle = \langle x, ((T + S)^* - S)y \rangle$. Se sigue entonces de la definición del dominio del operador adjunto que $y \in \mathcal{D}(T^*)$, y como T es autoadjunto, $y \in \mathcal{D}(T)$, que es lo que se quería probar. **Q.E.D.**

Considerese ahora el operador *multiplicación por q* definido en $L^2(\Gamma)$ como: $(u_b) \mapsto (q_b u_b) =: qu$. Puesto que $q \in L^\infty(\Gamma)$, se tiene:

$$\|qu\|_{L^2(\Gamma)}^2 := \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} |q_b|^2 |u_b|^2 dx \leq \sum_{b \in \mathcal{B}} \|q_b\|_{L^\infty[0, \ell(b)]}^2 \|u_b\|_{L^2[0, \ell(b)]}^2 \leq \|q\|_{L^\infty(\Gamma)}^2 \|u\|_{L^2(\Gamma)}^2.$$

Así, el operador multiplicación por q es acotado. Además, suponiendo que las funciones componentes q_b son funciones de valor real se cumple:

$$\langle qu, v \rangle_{L^2(\Gamma)} = \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} q_b u_b \bar{v}_b dx = \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} u_b \bar{q}_b \bar{v}_b dx = \langle u, qv \rangle_{L^2(\Gamma)}.$$

De este modo, el operador multiplicación por q es simétrico. Dado que nuestro hamiltoniano es precisamente la suma del operador menos segunda derivada, más el operador multiplicación por q , por el Lema 6 tenemos el siguiente resultado.

Teorema 21. El hamiltoniano \mathcal{H} dado por el operador de Schrödinger con un potencial $q \in L^\infty(\Gamma)$ de valor real, y con dominio (3.22), es un operador autoadjunto en $L^2(\Gamma)$.

3.3. Propiedades espectrales de un grafo cuántico

En la literatura referente a los grafos cuánticos, cuando se dice que un grafo Γ cumple cierta propiedad, lo que en realidad se está diciendo es que el hamiltoniano definido en el grafo cumple con dicha propiedad. Por ello, cuando se habla del *espectro de un grafo cuántico*, en realidad, nos referimos al espectro de su hamiltoniano. Para nuestro caso, el hamiltoniano es el operador de Schrödinger con un potencial $q \in L^\infty(\Gamma)$ de valor real, el cual, como vimos en la sección anterior, es un operador autoadjunto, lo que conlleva al siguiente resultado, que es una consecuencia del teorema 2.

Teorema 22. *El hamiltoniano \mathcal{H} dado por el operador de Schrödinger con un potencial $q \in L^\infty(\Gamma)$ de valor real y con dominio (3.22), tiene espectro real, i.e. $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) \subset \mathbb{R}$ y es un subconjunto cerrado. Más aún, $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \mathfrak{S}_p(\mathcal{H}) \cup \mathfrak{S}_c(\mathcal{H})$.*

Es de particular interés analizar los casos para los cuales $\mathfrak{S}_p(T) \neq \emptyset$, y por supuesto estudiar la forma de encontrar los valores propios y las “funciones propias” de la ecuación de Schrödinger

$$\mathcal{H}u = \lambda u, \quad u \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$$

Dicho problema será llamado el **problema de Sturm-Liouville** para el grafo cuántico Γ .

A continuación, estudiaremos algunas cotas para el espectro $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$. La siguiente proposición será de gran utilidad.

Proposición 15. *Para cualquier $u \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$ se cumple la siguiente desigualdad:*

$$\langle \mathcal{H}u, u \rangle_{L^2(\Gamma)} \geq M_q \|u\|_{L^2(\Gamma)}, \quad (3.26)$$

donde M_q es alguna constante que satisface:

$$\forall b \in \mathcal{B} \quad M_q \leq q_b(x) \quad \text{c.t.p. de } [0, \ell(b)] \quad (3.27)$$

Demostración. Para cada $u \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$ se tiene:

$$\langle \mathcal{H}u, u \rangle_{L^2(\Gamma)} = \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} (-u_b'') \bar{u}_b dx + \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} q_b u_b \bar{u}_b dx.$$

En pruebas anteriores se ha visto que $\sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} (-u_b'') \bar{u}_b dx = \|u'\|_{L^2(\Gamma)}^2$. Por otro lado, por la propiedad (3.27) de la constante M_q :

$$\sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} q_b u_b \bar{u}_b dx \geq \sum_{b \in \mathcal{B}} \int_0^{\ell(b)} M_q |u_b|^2 dx = M_q \|u\|_{L^2(\Gamma)}^2$$

Luego

$$\langle \mathcal{H}u, u \rangle_{L^2(\Gamma)} \geq \|u'\|_{L^2(\Gamma)}^2 + M_q \|u\|_{L^2(\Gamma)}^2 \geq M_q \|u\|_{L^2(\Gamma)}^2$$

Q.E.D.

Existen varias formas de escoger la cota M_q de la proposición 15. Una de ellas es considerar el hecho de que, para cada $b \in \mathcal{B}$ se cumple: $-\|q_b\|_{L^\infty[0,\ell(b)]} \leq q_b(x)$, c.t.p. de $[0, \ell(b)]$. Luego se puede tomar:

$$M_q = \inf_{b \in \mathcal{B}} (-\|q_b\|_{L^\infty[0,\ell(b)]}) = -\sup_{b \in \mathcal{B}} \|q_b\|_{L^\infty[0,\ell(b)]} = -\|q\|_{L^\infty(\Gamma)}.$$

Un caso muy común (e importante) en la práctica, es cuando se tiene un grafo Γ equilateral, cuyas aristas tienen longitud ℓ , y tal que el potencial q sea generado por una función $q \in C[0, \ell]$. En este caso, se suele tomar $M_q = \inf_{x \in [0, \ell]} q(x)$.

La importancia de la desigualdad (3.26) es que nos permite encontrar un intervalo en el cual está contenido el espectro $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$, como se establece en el siguiente teorema.

Teorema 23. *Sea M_q una constante que satisface la condición (3.27). Entonces:*

$$\mathfrak{S}(\mathcal{H}) \subset [M_q, +\infty) \quad (3.28)$$

Demostración. Probaremos primero que si $\lambda \in (-\infty, M_q)$, entonces $\lambda \in \rho(\mathcal{H})$. Sea $u \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$. Notemos que por ser \mathcal{H} autoadjunto, se tiene que:

$$\langle \mathcal{H}u, u \rangle_{L^2(\Gamma)} = \langle u, \mathcal{H}u \rangle_{L^2(\Gamma)} = \overline{\langle \mathcal{H}u, u \rangle_{L^2(\Gamma)}},$$

entonces $\langle \mathcal{H}u, u \rangle_{L^2(\Gamma)} \in \mathbb{R}$. Ahora, si $\lambda < M_q$, por la propiedad (3.26), se cumple:

$$\begin{aligned} (M_q - \lambda)\|u\|_{L^2(\Gamma)}^2 &\leq \langle \mathcal{H}u, u \rangle_{L^2(\Gamma)} - \lambda \langle u, u \rangle_{L^2(\Gamma)} \\ &\leq |\langle (\mathcal{H} - \lambda \mathbf{1})u, u \rangle_{L^2(\Gamma)}| \\ \text{(Cauchy-Schwarz)} \quad &\leq \|(\mathcal{H} - \lambda \mathbf{1})u\|_{L^2(\Gamma)} \|u\|_{L^2(\Gamma)} \end{aligned}$$

Si $u \neq 0$, dividiendo entre $\|u\|_{L^2(\Gamma)}$ en la desigualdad anterior se tiene que

$$\|(\mathcal{H} - \lambda \mathbf{1})u\|_{L^2(\Gamma)} \geq (M_q - \lambda)\|u\|_{L^2(\Gamma)}.$$

Además, si $u = 0$, la desigualdad anterior es válida, de modo que:

$$\|(\mathcal{H} - \lambda \mathbf{1})u\|_{L^2(\Gamma)} \geq (M_q - \lambda)\|u\|_{L^2(\Gamma)}, \quad \forall u \in \mathcal{D}(\mathcal{H}).$$

Se sigue del teorema 3 que $\lambda \in \rho(T)$. De este modo, si $\lambda \in \mathfrak{S}(\mathcal{H})$, entonces $\lambda \in \mathbb{R} \setminus (-\infty, M_q) = [M_q, +\infty)$. $\therefore \mathfrak{S}(\mathcal{H}) \subset [M_q, +\infty)$ **Q.E.D.**

Ahora que se ha visto que el espectro es acotado inferiormente y consta solo del espectro puntual y continuo, procedemos a analizar la naturaleza del mismo para el caso en que Γ es un grafo compacto.

Recordemos que el espectro discreto consta de todos los valores propios aislados (de aquí el nombre de “discreto”) de multiplicidad finita. En este sentido, es muy similar al espectro de una matriz.

Un ejemplo muy importante de un operador con espectro puramente discreto, es el operador de Sturm-Liouville $\mathcal{S} : \mathcal{D}(\mathcal{S}) \subset L^2[a, b] \rightarrow L^2[a, b]$, cuya acción esta dada por:

$$\mathcal{S}y = -(py')' + qy.$$

Suponemos que el intervalo $[a, b] \subset \mathbb{R}$ es compacto, los coeficientes p, q son “regulares” (i.e., $p, p', q \in C[a, b]$, $p > 0$, q de valor real) y el dominio de \mathcal{S} consiste de todas las funciones $y \in C^2[a, b]$ que satisfacen las condiciones de frontera

$$\alpha_1 y(a) + \alpha_2 y'(a) = 0, \quad \beta_1 y(b) + \beta_2 y'(b) = 0,$$

con $|\alpha_1| + |\alpha_2| > 0$, $|\beta_1| + |\beta_2| > 0$. Como pudimos ver en los preliminares, el teorema de Sturm-Liouville establece que los valores propios del operador \mathcal{S} son reales y simples, y forman una sucesión creciente

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \infty$$

tal que $\lambda_n \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$, además de que las funciones propias $\{\psi_n\}_{n=1}^\infty$ forman una base ortogonal para $L^2[a, b]$ (véase [1, pág. 84]).

Puesto que el estudio del espectro de los grafos cuánticos es, en cierta forma, una generalización del problema de Sturm-Liouville a grafos métricos, se esperaría obtener un resultado similar al teorema de Sturm-Liouville, para ciertos grafos. Resulta que esto se cumple para *grafos compactos*, análogo a como el teorema es válido para intervalos compactos (para grafos infinitos se tienen resultados similares a los de la ecuación de Sturm-Liouville en \mathbb{R} , como se verá en la siguiente sección).

Para establecer el teorema de Sturm-Liouville para grafos compactos, requerimos algunas definiciones y resultados técnicos.

Definición 34. Sea \mathcal{H} espacio de Hilbert y $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido. Decimos que T tiene **resolvente compacto**, si existe un valor $\lambda_0 \in \rho(T)$ tal que $R_T(\lambda_0) = (T - \lambda_0 \mathbf{1})^{-1} \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$.

Proposición 16. Sea $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido y autoadjunto en un espacio de Hilbert \mathcal{H} . Suponga que T tiene resolvente compacto. Entonces:

$$\forall \lambda \in \rho(T) \quad R_T(\lambda) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$$

Demostración. Como T tiene resolvente compacto, existe $\lambda_0 \in \rho(T)$ tal que $R_T(\lambda_0) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$. Sea $\lambda \in \rho(T)$ arbitrario. Como T es autoadjunto, entonces es un operador cerrado, y por la identidad de Hilbert para el resolvente (teorema 4) se tiene

$$R_T(\lambda) - R_T(\lambda_0) = (\lambda - \lambda_0)R_T(\lambda)R_T(\lambda_0).$$

Como $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ es un ideal en el álgebra $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, se tiene que $(\lambda - \lambda_0)R_T(\lambda)R_T(\lambda_0) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$. Nuevamente por ser $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ un ideal, de la ecuación anterior se sigue que:

$$R_T(\lambda) = R_T(\lambda_0) + (\lambda - \lambda_0)R_T(\lambda)R_T(\lambda_0) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$$

Q.E.D.

Esta proposición justifica el porque se necesita comprobar con un solo valor $\lambda_0 \in \rho(T)$ que $R_T(\lambda_0) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ para decir que T tiene resolvente compacto.

En los siguientes resultados supondremos que \mathcal{H} es un espacio de Hilbert de dimensión infinita, a fin de poder emplear los resultados del teorema 5, sobre el espectro de operadores compactos autoadjuntos.

Proposición 17. Sea $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido y autoadjunto. Suponga que existe $\lambda_0 \in \rho(T)$ para el cual $R_T(\lambda_0) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$. Entonces

$$\mathfrak{S}(T) = \left\{ \lambda_0 + \frac{1}{\mu} \mid \mu \in \mathfrak{S}_p(R_T(\lambda_0)) \setminus \{0\} \right\}$$

Demostración. Para simplificar notación, durante la prueba denotaremos $R = R_T(\lambda_0)$. [\Leftarrow] Sea $\mu \in \mathfrak{S}_p(R) \setminus \{0\}$ y $x \in \mathcal{D}(R)$ tal que $Rx = \mu x$. Definamos $\xi = \lambda_0 + \frac{1}{\mu}$. Se tiene que:

$$Rx = \mu x \Rightarrow x = R^{-1}(\mu x) = (T - \lambda_0 \mathbf{1})(\mu x) = \mu Tx - \mu \lambda_0 x.$$

Luego: $\mu Tx = (\mu \lambda_0 + 1)x \Rightarrow Tx = \left(\lambda_0 + \frac{1}{\mu}\right)x = \xi x$. Además:

$$x = R \left(\frac{1}{\mu} x \right) \in \mathcal{R}((T - \lambda_0 \mathbf{1})^{-1}) = \mathcal{D}(T - \lambda_0) = \mathcal{D}(T).$$

Así, $\xi \in \mathfrak{S}(T)$ con lo cual $\left\{ \lambda_0 + \frac{1}{\mu} \mid \mu \in \mathfrak{S}_p(R) \setminus \{0\} \right\} \subset \mathfrak{S}(T)$.

[\Rightarrow] Tómese ahora $\xi \in \mathfrak{S}(T)$ y defina $\mu = \frac{1}{\xi - \lambda_0}$ (el cual está bien definido, pues $\lambda_0 \notin \mathfrak{S}(T)$). Supongamos que $\mu \in \rho(R)$, entonces $S = R - \mu \mathbf{1}$ es invertible. Sin embargo, notemos que:

$$R - \mu \mathbf{1} = R - \mu R(T - \lambda_0 \mathbf{1}) = R \left(\mathbf{1} - \frac{1}{\xi - \lambda_0} T + \frac{\lambda_0}{\xi - \lambda_0} \mathbf{1} \right) = \frac{1}{\xi - \lambda_0} R(\xi \mathbf{1} - T).$$

Entonces $S = -\mu R(T - \xi \mathbf{1})$, y como S y $-\mu R$ son invertibles, se tendría que $T - \xi \mathbf{1}$ sería invertible, lo cual contradice que $\xi \in \mathfrak{S}(T)$. Luego, $\mu = \frac{1}{\xi - \lambda_0} \in \mathfrak{S}(R)$. Además como $\mu \neq 0$ y R es compacto, se tiene que $\mu \in \mathfrak{S}_p(R)$. Observamos entonces que $\xi = \lambda_0 + \frac{1}{\mu} \therefore \mathfrak{S}(T) \subset \left\{ \lambda_0 + \frac{1}{\mu} \mid \mu \in \mathfrak{S}_p(R) \setminus \{0\} \right\}$ y la igualdad se obtiene de la contención anterior. **Q.E.D.**

Corolario 4. Sea $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido, autoadjunto y con resolvente compacto. Entonces $\mathfrak{S}(T) = \mathfrak{S}_p(T)$, es un conjunto a lo más numerable y todos los valores propios tienen multiplicidad finita.

Demostración. Por definición de resolvente compacto, existe $\lambda_0 \in \rho(T)$ tal que $R = R_T(\lambda_0) \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$. Considere la función $f : \mathbb{C} \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{C} \setminus \{\lambda_0\}$ dada por $f(z) = \lambda_0 + \frac{1}{z}$, la cual es un homeomorfismo. Por la proposición 17, $\mathfrak{S}(T) = f(\mathfrak{S}_p(R) \setminus \{0\})$ y como R es compacto, del teorema 5, $\mathfrak{S}_p(R) \setminus \{0\}$ es a lo más numerable. Entonces $\mathfrak{S}(T)$ es un conjunto lo más numerable.

Ahora tómese $\xi \in \mathfrak{S}(T)$ y sea $\mu \in \mathfrak{S}_p(T) \setminus \{0\}$ tal que $\xi = \lambda_0 + \frac{1}{\mu}$. Sea $E_\mu(R) = \ker(R - \mu \mathbf{1})$ el espacio propio generado por μ . Se tiene que:

$$\begin{aligned} x \in E_\mu(R) &\Leftrightarrow Rx = \mu x \\ &\Leftrightarrow Rx = \frac{1}{\xi - \lambda_0} x \\ &\Leftrightarrow (\xi - \lambda_0)x = R^{-1}x \\ &\Leftrightarrow \xi x - \lambda_0 x = Tx - \lambda_0 x \\ &\Leftrightarrow Tx = \xi x \\ &\Leftrightarrow x \in E_\xi(T). \end{aligned}$$

Luego $\xi \in \mathfrak{S}_p(T)$, y además $E_\mu(R) = E_\xi(T)$. Luego, por el inciso (ii) del teorema 5, $\dim E_\xi(T) = \dim E_\mu(R) < \infty$. Así, $\xi \in \mathfrak{S}_p(T)$ y $m_T(\xi) < \infty$. Puesto que $\xi \in \mathfrak{S}(T)$ es arbitrario, tenemos que $\mathfrak{S}(T) = \mathfrak{S}_p(T)$ y todos los valores propios tienen multiplicidad finita. **Q.E.D.**

Lema 7. *Sea \mathcal{H} es un espacio de Hilbert separable y $T : \mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un operador densamente definido, autoadjunto con resolvente compacto, para el cual existe $\lambda_0 \in \rho(T)$ tal que $R = R_T(\lambda_0)$ es autoadjunto. Entonces $\mathfrak{S}(T) = \mathfrak{S}_d(T) = \{\lambda_k\}_{k=0}^\infty$, y los valores propios satisfacen que $|\lambda_k| \rightarrow \infty, k \rightarrow \infty$.*

Demostración. Como el espacio \mathcal{H} es separable y R es compacto y autoadjunto, por el teorema 5 existe una base ortonormal de vectores propios de R . Como R es invertible, $0 \notin \mathfrak{S}_p(R)$, y como dos espacios propios $E_\lambda(R)$ y $E_\mu(R)$ son mutuamente ortogonales si $\lambda \neq \mu$ (pues R es autoadjunto), se tiene que $\mathcal{H} = \bigoplus_{\lambda \in \mathfrak{S}_p(T)} E_\mu(R)$.

Por ser R compacto, para cada $\mu \in \mathfrak{S}_p(T)$, $\dim E_\mu(R) < \infty$, y como \mathcal{H} tiene dimensión infinita entonces debe haber una cantidad infinita numerable de valores propios $\mathfrak{S}(R) = \{\mu_k\}_{k=0}^\infty$, los cuales son reales por ser R autoadjunto. Además, por la compacidad de R , $\mu_k \rightarrow 0, k \rightarrow \infty$.

Consideremos ahora la función $f : \mathbb{C} \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{C} \setminus \{\lambda_0\}$ dada por $f(z) = \lambda_0 + \frac{1}{z}$. Por la proposición 17, $\mathfrak{S}(T) = f(\mathfrak{S}_p(R))$ y como $\mu_k \rightarrow 0, k \rightarrow \infty$, se tiene que $|\lambda_k| = |f(\mu_k)| \rightarrow \infty, k \rightarrow \infty$, y dado que 0 es el único punto de acumulación de $\mathfrak{S}_p(R)$, entonces $\mathfrak{S}(T) = \{\lambda_k\}_{k=0}^\infty$ debe ser una sucesión de puntos aislados. Finalmente por el corolario 4, $\mathfrak{S}(T) = \mathfrak{S}_p(T)$ y cada $\lambda_k \in \mathfrak{S}_p(T)$ tiene multiplicidad finita. $\therefore \mathfrak{S}(T) = \mathfrak{S}_d(T)$. **Q.E.D.**

Ahora todos los preparativos están listos para enunciar el teorema de Sturm-Liouville para grafos compactos.

Teorema 24. (Sturm-Liouville para grafos compactos) *Sea Γ un grafo cuántico compacto, y \mathcal{H} el hamiltoniano que actúa como el operador de Schrödinger, con un potencial $q \in L^\infty(\Gamma)$ de valor real y dominio (3.22). Entonces $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \mathfrak{S}_d(\mathcal{H})$ y los valores propios forman una sucesión creciente*

$$M_q \leq \lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_n < \dots < +\infty, \quad (3.29)$$

tal que $\lambda_n \rightarrow \infty, n \rightarrow \infty$, y donde M_q es una constante que cumple la propiedad (3.27).

Demostración. Dividiremos la demostración en tres pasos:

Paso 1: \mathcal{H} tiene resolvente compacto. Por el teorema 3.28, $\mathfrak{S}(T) \subset [M_q, +\infty)$. Tomemos $\lambda_0 \in (-\infty, M_q)$, de tal forma que $\lambda_0 \in \rho(\mathcal{H})$. Sea $R = R_{\lambda_0}(\mathcal{H})$, el cual actúa como:

$$R : \mathcal{R}(\mathcal{H} - \lambda_0 \mathbf{1}) \rightarrow \mathcal{D}(\mathcal{H}) \subset H^2(\Gamma).$$

El operador R puede ser visto como un operador $R : \mathcal{R}(\mathcal{H} - \lambda_0 \mathbf{1}) \rightarrow L^2(\Gamma)$, haciendo la composición con el encaje $\iota_\Gamma : H^2(\Gamma) \hookrightarrow L^2(\Gamma)$. Observemos que $\iota_\Gamma = \bigoplus_{b \in \mathcal{B}} \iota_b$, donde $\iota_b : H^2(0, \ell(b)) \hookrightarrow L^2[0, \ell(b)]$ es el encaje de $H^2(0, \ell(b))$ en $L^2[0, \ell(b)]$.

Los teoremas clásicos de encajes de Sobolev establecen que ι_b es un encaje compacto (véase [7, pág. 213]) y por el teorema 14, Γ es un grafo finito, con lo cual $\iota_\Gamma = \bigoplus_{b \in \mathcal{B}} \iota_b$ es

una suma directa finita de operadores compactos. Se sigue del lema 4 que ι_Γ es compacto. Entonces $R \in \mathcal{K}(L^2(\Gamma))$, con lo cual \mathcal{H} tiene resolvente compacto y por el corolario 4, $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \mathfrak{S}_p(\mathcal{H})$. y todos los valores propios tienen multiplicidad finita.

Paso 2: Existe un resolvente autoadjunto. Ahora veamos que el resolvente R es autoadjunto. Como R es acotado, basta verificar que:

$$\forall x, y \in \mathcal{R}(T - \lambda_0) \quad \langle Rx, y \rangle = \langle x, Ry \rangle.$$

Tomemos entonces $x, y \in \mathcal{R}(T - \lambda_0)$ y observemos que:

$$\begin{aligned} \langle Rx, y \rangle_{L^2(\Gamma)} &= \langle Rx, (\mathcal{H} - \lambda_0)Ry \rangle_{L^2(\Gamma)} \\ &= \langle Rx, \mathcal{H}Ry \rangle_{L^2(\Gamma)} - \langle Rx, \lambda_0 Ry \rangle_{L^2(\Gamma)} \\ (Rx, Ry \in \mathcal{D}(T)) &= \langle \mathcal{H}^* Rx, Ry \rangle_{L^2(\Gamma)} - \langle Rx, \lambda_0 Ry \rangle_{L^2(\Gamma)} \\ (\lambda_0 \in \mathbb{R} \text{ y } \mathcal{H} \text{ es autoadjunto}) &= \langle \mathcal{H}Rx, Ry \rangle_{L^2(\Gamma)} - \langle \lambda_0 Rx, Ry \rangle_{L^2(\Gamma)} \\ &= \langle (\mathcal{H} - \lambda_0)Rx, Ry \rangle_{L^2(\Gamma)} \\ &= \langle x, Ry \rangle_{L^2(\Gamma)} \end{aligned}$$

Luego R es autoadjunto y como $L^2(\Gamma)$ es separable, por el lema 7 se tiene que $\mathfrak{S}(T) = \mathfrak{S}_d(\mathcal{H}) = \{\lambda_k\}_{k=0}^\infty$ y $|\lambda_k| \rightarrow \infty, k \rightarrow \infty$.

Paso 3: El espectro satisface (3.29). Por el teorema 3.28 tenemos que $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \{\lambda_n\}_{n=0}^\infty \subset [M_q, +\infty)$, de modo que la sucesión es acotada inferiormente y sus valores absolutos crecen indefinidamente. Entonces se debe tener que $\lambda_k \rightarrow \infty, k \rightarrow \infty$. Además, como $\{\lambda_k\}_{k=0}^\infty$ es un conjunto discreto numerable, podemos ordenar los valores λ_k en forma creciente y reindexar de tal forma que

$$M_q \leq \lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_n < \dots$$

Tal reordenamiento no afecta el hecho de que $\lambda_n \rightarrow \infty, n \rightarrow \infty$, con lo cual concluye la prueba. **Q.E.D.**

De este modo hemos obtenido una generalización del teorema clásico de Sturm-Liouville para grafos compactos. Sin embargo, solamente un punto es diferente en ambos casos: los valores propios en un grafo compacto no necesariamente son simples, como sucede en el caso de un intervalo $[a, b]$.

Ejemplo 4. Considere el grafo estrella con 3 vértices periféricos y uno central, como se muestra en la figura 3.2. Las aristas están dirigidas de los vértices periféricos hacia el central, y supondremos que el grafo es equilateral con longitud $\ell = 1$.

Los espacios $L^2(\Gamma)$ y $H^2(\Gamma)$ son espacios de ternas de funciones $u = (u_1, u_2, u_3)$, con $u_i \in L^2[0, 1], i = 1, 2, 3$, para $u \in L^2(\Gamma)$, y $u_i \in H^2(0, 1), i = 1, 2, 3$, para $u \in H^2(\Gamma)$.

El hamiltoniano del grafo está dado el operador menos segunda derivada:

$$\mathcal{H}u = (-u_1'', -u_2'', -u_3''),$$

cuyo dominio son las ternas $u \in H^2(\Gamma)$ que satisfacen la condición de continuidad, que se reduce sólo al vértice central:

$$u_1(1) = u_2(1) = u_3(1), \tag{3.30}$$

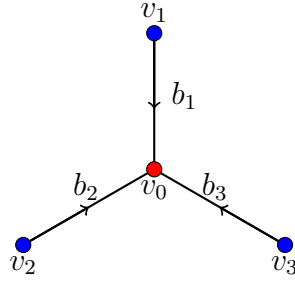


Figura 3.2: Grafo estrella equilateral de longitud 1 con las aristas dirigidas hacia el centro.

y las condiciones de Kirchhoff en los vértices periféricos:

$$u'_i(0) = 0, \quad (3.31)$$

y en el vértice central:

$$-u'_1(1) - u'_2(1) - u'_3(1) = 0. \quad (3.32)$$

Por el teorema de Sturm-Liouville para grafos compactos, el espectro $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ consiste de todos los valores $\lambda = \omega^2$ para los cuales, el sistema de ecuaciones:

$$-u''_i(x) = \omega^2 u_i(x), \quad 0 < x < 1, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.33)$$

tiene una terna de soluciones $u = (u_1, u_2, u_3)$ no trivial que satisface las condiciones (3.30)-(3.32).

Primero supongamos que $\omega = 0$, de modo que el sistema de ecuaciones a considerar es $u''_i(x) = 0$, $i = 1, 2, 3$. Entonces, para cada b_i la solución está dada por:

$$u_i(x) = A_i x + B_i, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad A_i, B_i \in \mathbb{C}, \quad i = 1, 2, 3.$$

De la condición de Kirchhoff periférica se tiene que $0 = u'_i(0) = A_i$, con lo cual $u_i(x) = B_i$. Luego, de la condición de continuidad en el vértice central se tiene que: $u_1(1) = u_2(1) = u_3(1) \Rightarrow B_1 = B_2 = B_3$. Además $u_i(x) = B_i$, $i = 1, 2, 3$ satisface la condición de Kirchhoff en el vértice central. Entonces, $u = (B, B, B)$, con $B \in \mathbb{C}$ es una función propia para $\omega = 0$.

Ahora supongamos que $\omega \neq 0$. Sabemos que para cada arista b_i , la ec. (3.33) tiene como solución general:

$$u_i(x) = A_i \cos(\omega x) + B_i \sin(\omega x), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad A_i, B_i \in \mathbb{C}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Por la condición de Kirchhoff periférica se tiene:

$$0 = u'_i(0) = (-\omega A_i \sin(\omega x) + \omega B_i \cos(\omega x)) \Big|_{x=0} = \omega B_i.$$

De aquí se obtiene que:

$$u_i(x) = A_i \cos(\omega x), \quad i = 1, 2, 3.$$

Ahora aplicamos la condición de Kirchhoff en el vértice central:

$$0 = -\sum_{i=1}^3 u'_i(1) = \sum_{i=1}^3 \omega A_i \sin(\omega) = \omega \sin(\omega) \left(\sum_{i=1}^3 A_i \right).$$

Por otro lado, por la condición de continuidad se tiene:

$$A_1 \cos(\omega) = A_2 \cos(\omega) = A_3 \cos(\omega).$$

Así, $\lambda = \omega^2 \in \mathfrak{S}(\mathcal{H})$ si y sólo si, existe una terna de valores $(A_1, A_2, A_3) \in \mathbb{C}$ que satisfaga:

$$\begin{cases} \omega \sin(\omega) \left(\sum_{i=1}^3 A_i \right) = 0 \\ A_1 \cos(\omega) = A_2 \cos(\omega) = A_3 \cos(\omega). \end{cases} \quad (3.34)$$

Si $\cos(\omega) \neq 0$ y $\sin(\omega) \neq 0$, entonces de la segunda ecuación se deduce que $A_1 = A_2 = A_3 = A$, luego la primera ecuación se reduce a $3A = 0$, con lo cual $A_i = 0$, $i = 1, 2, 3$, y entonces $u_i \equiv 0$, con lo cual $u \equiv 0$ y $\lambda = \omega^2$ no es un valor propio.

Si $\cos(\omega) = 0$, entonces $\sin(\omega) \neq 0$ y de la primera ecuación en (3.34) se tiene que $A_1 + A_2 + A_3 = 0$.

Por otro lado, si $\sin(\omega) = 0$, entonces $\cos(\omega) \neq 0$ y de la segunda ecuación se tiene $A_1 = A_2 = A_3$.

De este modo tenemos que $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \left\{ \frac{n^2\pi^2}{4} \right\}_{n=0}^{\infty}$. Observemos que $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) \subset [0, +\infty)$ y esto coincide con el enunciado del teorema 23, pues en este caso $M_q = 0$ es una constante que satisface la condición (3.27).

Ahora analicemos la multiplicidad de los valores propios. Sea $k \in \mathbb{N}_0$:

Si $\omega = 2k\pi$ y $k = 0$, entonces las funciones propias correspondientes son de la forma $u = (B, B, B)$, con $B \in \mathbb{C}$. Así

$$E_0(\mathcal{H}) = \mathcal{S} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}.$$

Si $\omega = 2k\pi$ y $k \neq 0$, entonces $\sin(\omega) = 0$, de modo que $A_1 = A_2 = A_3$ y podemos tomar $A \in \mathbb{C}$ y $u = (A, A, A) \cdot \cos(\omega x)$ será una función propia. En consecuencia:

$$E_{k^2\pi^2}(\mathcal{H}) = \mathcal{S} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \cos\left(\frac{k\pi}{2}x\right) \right\}.$$

Por otro lado, si $\omega = \frac{2k+1}{2}\pi$, entonces $\cos(\omega) = 0$ con lo cual $A_1 + A_2 + A_3 = 0$, y podemos tomar $A_1 = -(A_2 + A_3)$, con $A_2, A_3 \in \mathbb{C}$ arbitrarios. Así

$$u = (-A_2 - A_3, A_2, A_3) \cdot \cos(\omega x) = A_2(-\cos(\omega x), \cos(\omega x), 0) + A_3(-\cos(\omega x), 0, \cos(\omega x)).$$

De este modo:

$$E_{\left(\frac{2k+1}{2}\right)^2\pi^2}(\mathcal{H}) = \mathcal{S} \left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \cos\left(\frac{2k+1}{2}\pi x\right), \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \cos\left(\frac{2k+1}{2}\pi x\right) \right\}$$

En conclusión:

$$m_{\mathcal{H}}\left(\frac{n^2\pi^2}{4}\right) = \begin{cases} 1, & \text{si } n \text{ es par,} \\ 2, & \text{si } n \text{ es impar.} \end{cases}$$

De este ejemplo podemos ver claramente que los valores propios no necesariamente son simples.

Comentarios y observaciones

En esta sección hemos analizado el hamiltoniano dado por el operador de Schrödinger, cuyas condiciones de frontera asociadas son las de N-K. Sin embargo, como se comentó al principio del capítulo existen otros tipos de hamiltonianos que se pueden considerar, como por ejemplo el *operador de Schrödinger magnético*:

$$\mathcal{M}u = \left(\left(\frac{1}{i} \frac{d}{dx} - A_b(x) \right)^2 u_b(x) + V_b(x)u_b(x) \right)_{b \in \mathcal{B}}.$$

A diferencia del operador de Schrödinger usual, que bajo ciertas condiciones en el potencial q puede considerarse independiente de la dirección de las aristas, el operador \mathcal{M} depende completamente de la dirección dada. De hecho, A se considera como un *campo vectorial unidimensional*, pues cumple la propiedad: $A_b(x) = -A_b(\ell(b) - x)$, $\forall b \in \mathcal{B}$. El análisis de éste operador junto con algunas propiedades espectrales pueden encontrarse por ejemplo, en [6].

También es importante comentar que existen diversas condiciones de frontera para un hamiltoniano. Tal como se hizo para las condiciones de N-K, se busca que las condiciones de frontera en un vértice v puedan ser escritas en la forma matricial

$$\mathbf{A}_v \mathbf{u}(v) + \mathbf{B}_v \mathbf{u}'(v) = 0,$$

donde $\mathbf{A}_v, \mathbf{B}_v \in \mathcal{M}_{d_v}(\mathbb{C})$. En [6] se establecen las condiciones bajo las cuales el operador menos segunda derivada (y en consecuencia, el operador de Schrödinger con potencial real) sean autoadjuntos.

Teorema 25. [6, pág. 18] Sea Γ un grafo cuántico compacto, y $\mathcal{H} : \mathcal{D}(\mathcal{H}) \subset L^2(\Gamma) \rightarrow L^2(\Gamma)$ el hamiltoniano dado por $\mathcal{H}u = (-u''_b)$, cuyo dominio son funciones $u \in H^2(\Gamma)$ que en cada vértice satisfacen una condición lineal, que involucra sus valores y los de su derivada. Los siguientes enunciados son equivalentes:

(i) \mathcal{H} es autoadjunto en $L^2(\Gamma)$.

(ii) Para cada $v \in \mathcal{V}$, existen $\mathbf{A}_v, \mathbf{B}_v \in \mathcal{M}_{d_v}(\mathbb{C})$ tales que:

1. La matriz concatenada $(\mathbf{A}_v \mathbf{B}_v) \in \mathcal{M}_{d_v \times 2d_v}(\mathbb{C})$ tiene rango máximo, i.e. $\text{rank}(\mathbf{A}_v \mathbf{B}_v) = d_v$.
2. $\mathbf{A}_v \mathbf{B}_v^*$ es autoadjunta.
3. $\forall u \in \mathcal{D}(\mathcal{H}) \quad \mathbf{A}_v \mathbf{u}(v) + \mathbf{B}_v \mathbf{u}'(v) = 0$.

(iii) Para cada $v \in \mathcal{V}$, existe $\mathbf{U}_v \in \mathcal{M}_{d_v}(\mathbb{C})$ unitaria tal que:

$$\forall u \in \mathcal{D}(\mathcal{H}) \quad i(\mathbf{U}_v - \mathbf{1}_{d_v}) \mathbf{u}(v) + (\mathbf{U}_v + \mathbf{1}_{d_v}) \mathbf{u}'(v),$$

donde $\mathbf{1}_{d_v}$ es la matriz identidad de dimensión d_v .

(iv) Para cada $v \in \mathcal{V}$, existen proyectores mutuamente ortogonales $\mathbf{P}_{D,v}$, $\mathbf{P}_{N,v}$ y $\mathbf{P}_{R,v} := \mathbf{1}_{d_v} - \mathbf{P}_{D,v} - \mathbf{P}_{N,v}$, definidos en \mathbb{C}^{d_v} , junto con un operador Λ_v , invertible y autoadjunto el cual está definido en $\mathbf{P}_{R,v}\mathbb{C}^{d_v}$, tales que, para todo $u \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$ se cumple:

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{D,v}\mathbf{u}(v) = 0 & (\text{Parte de Dirichlet}), \\ \mathbf{P}_{N,v}\mathbf{u}'(v) = 0 & (\text{Parte de Neumann}), \\ \mathbf{P}_{R,v}\mathbf{u}'(v) = \Lambda_v\mathbf{P}_{R,v}\mathbf{u}(v) & (\text{Parte de Robin}). \end{cases}$$

Por supuesto, la representación matricial de las condiciones de N-K es un caso particular del inciso (i) de este teorema.

Un ejemplo de condición en los vértices muy utilizado son las llamadas *condiciones tipo δ* , las cuales para un vértice v son de la forma:

$$\begin{cases} u \text{ es continua en } v, \\ \sum_{b \in \mathcal{B}_v} u'_b(v) = \alpha_v u(v) \end{cases},$$

donde $\alpha_v \in \mathbb{C}$. Las condiciones de N-K son el caso cuando $\alpha_v = 0$. Observemos que las condiciones tipo δ pueden ser escritas en forma matricial usando:

$$\mathbf{A}_v := \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -1 \\ -\alpha_v & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_v := \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Notamos que $\text{rank}(\mathbf{A}_v \mathbf{B}_v) = d_v$, además

$$\mathbf{A}_v \mathbf{B}_v^* = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & -\alpha_v \end{pmatrix}$$

de modo que $\mathbf{A}_v \mathbf{B}_v^*$ es autoadjunto si y sólo si, $\alpha_v \in \mathbb{R}$. Entonces, el operador menos segunda derivada con condiciones tipo δ es autoadjunto si y sólo si, $\alpha_v \in \mathbb{R}$. Un estudio sobre operadores con tales condiciones puede encontrarse en el capítulo 7 de [6].

Finalmente, a pesar de que el teorema 25 es aplicable sólo a grafos compactos, es posible extender estos resultados para grafos infinitos.

Teorema 26. [6, pág. 30] Sea Γ un grafo infinito que satisface la hipótesis 3. Sea $\mathcal{H} : \mathcal{D}(\mathcal{H}) \subset L^2(\Gamma) \rightarrow L^2(\Gamma)$ el operador dado por $\mathcal{H}u = (-u''_b)$, cuyo dominio $\mathcal{D}(\mathcal{H})$ consiste de todas las funciones $u \in H^2(\Gamma)$ que satisfacen la siguiente condición: para cada vértice v , existen proyectores mutuamente ortogonales $\mathbf{P}_{D,v}$, $\mathbf{P}_{N,v}$ y $\mathbf{P}_{R,v} := \mathbf{1}_{d_v} - \mathbf{P}_{D,v} - \mathbf{P}_{N,v}$, definidos en \mathbb{C}^{d_v} , junto con un operador Λ_v , invertible y autoadjunto el cual está definido en $\mathbf{P}_{R,v}\mathbb{C}^{d_v}$, tales que:

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{D,v}\mathbf{u}(v) = 0 & (\text{Parte de Dirichlet}), \\ \mathbf{P}_{N,v}\mathbf{u}'(v) = 0 & (\text{Parte de Neumann}), \\ \mathbf{P}_{R,v}\mathbf{u}'(v) = \Lambda_v\mathbf{P}_{R,v}\mathbf{u}(v) & (\text{Parte de Robin}). \end{cases}$$

Si $\sup_{v \in \mathcal{V}} \|\Lambda_v\|_2 < \infty$, donde $\|\cdot\|_2$ es la norma matricial inducida por la norma l_2 en \mathbb{C}^{d_v} , entonces \mathcal{H} es autoadjunto.

Un análisis detallado de las propiedades espectrales y las funciones propias de los operadores que satisfacen las condiciones del teorema 26, puede encontrarse en [25].

Grafos periódicos

No hay ninguna rama de la matemática, por abstracta que sea, que no pueda aplicarse algún día a los fenómenos del mundo real.

Nikolái Lobachevski
(1792–1856)

En muchas aplicaciones es común trabajar con grafos infinitos que pueden “generarse” a partir de un grafo finito por medio de traslaciones. Un ejemplo típico es el grafeno, cuya gráfica puede obtenerse a partir de un patrón hexagonal (véase [22]). En este tipo de grafos, se busca un *dominio fundamental* apropiado que genere todo el grafo, de tal forma que el estudio de ciertos hamiltonianos se reduzca al análisis de los mismos en dicho dominio fundamental. En este capítulo analizaremos las técnicas que permiten realizar tales procedimientos.

4.1. Acciones de grupo y dominios fundamentales

Comenzamos precisando la noción de grafo periódico.

Definición 35. Sea (\mathcal{G}, \cdot) un grupo y X un conjunto. Una *acción* del grupo \mathcal{G} sobre el conjunto X , es una función $\mathcal{A} : \mathcal{G} \times X \rightarrow X$ que satisface las siguientes condiciones:

- (i) $\forall g \in \mathcal{G} \quad x \mapsto \mathcal{A}(g, x)$ es una biyección en X .
- (ii) $\forall g_1, g_2 \in \mathcal{G} \quad \forall x \in X, \quad \mathcal{A}(g_1 \cdot g_2, x) = \mathcal{A}(g_1, \mathcal{A}(g_2, x))$.
- (iii) $\forall x \in X \quad \mathcal{A}(e, x) = x$, donde e es el elemento neutro de \mathcal{G} .

Si existe una acción de \mathcal{G} sobre X , se dice que X es un \mathcal{G} -conjunto.

En la práctica se suele denotar $g \cdot h = gh$ y $\mathcal{A}(g, x) = gx$.

Si X es un \mathcal{G} -conjunto, se define la siguiente relación para $x, y \in X$:

$$xRy \iff \exists g \in \mathcal{G} : gx = y. \tag{4.1}$$

Es fácil ver que esta relación es de equivalencia, y sus clases de equivalencia se denotan por

$$\mathcal{O}_x := \{y \in X \mid \exists g \in \mathcal{G} : y = gx\}$$

y se denominan *orbitas*. El espacio cociente generado por esta relación se suele denotar $X/G := \{\mathcal{O}_x \mid x \in X\}$.

Definición 36. Sea $m \in \mathbb{N}$. Un grafo métrico Γ se dice \mathbb{Z}^m -**periódico** (o simplemente periódico), si existe un grupo $\mathcal{G} \simeq \mathbb{Z}^m$, y una acción de G en Γ_{met} que satisface las siguientes condiciones:

- (i) **Continuidad:** $\forall g \in \mathcal{G} \ x \mapsto gx$ es continuo en Γ_{met} .
- (ii) \mathcal{G} **actúa fielmente sobre** Γ_{met} : $\forall g \in \mathcal{G} \ \forall \tilde{x} \in \Gamma_{met} \ g\tilde{x} = \tilde{x} \Rightarrow g = e$.
- (iii) **La acción es discreta:** $\forall \tilde{x} \in \Gamma_{met} \ \exists r > 0 : \forall g \in \mathcal{G} \setminus \{0\} \ gx \notin B_\Gamma(\tilde{x}, r)$.
- (iv) **Co-compacidad:** El espacio Γ_{met}/G es compacto (con la topología cociente inducida por la relación (4.1)).
- (v) **Preserva estructura:**
 - (a) $\forall \tilde{v}, \tilde{w} \in \mathcal{V}_{met} \ g\tilde{v} \sim g\tilde{w} \Rightarrow \tilde{v} \sim \tilde{w}$ (Preserva vértices adyacentes).
 - (b) $\forall g \in \mathcal{G} \ \forall b \in \mathcal{B} \ J_{gb} := g(J_b) \Rightarrow \ell(gb) = \ell(b)$ (Preserva longitudes).
 - (c) $\forall \tilde{x}, \tilde{y} \in \Gamma_{met} \ \forall g \in \mathcal{G} \ d_\Gamma(g\tilde{x}, g\tilde{y}) = d_\Gamma(\tilde{x}, \tilde{y})$ (Preserva distancias).
 - (d) $\forall \tilde{x}, \tilde{y} \in \Gamma_{met} \ \tilde{x}R\tilde{y} \text{ y } \tilde{y} \in \mathcal{V}_{met} \Rightarrow \tilde{x} \in \mathcal{V}_{met}$ (Preserva vértices).
 - (e) Además, si Γ es un grafo cuántico con hamiltoniano \mathcal{H} , la acción conmuta con \mathcal{H} (en particular, preserva las condiciones en los vértices).
 - (f) $\forall \hat{x}, \hat{y} \in \Gamma_{met} \ \forall g \in \mathcal{G} \ d_\Gamma(g + \hat{x}, g + \hat{y}) = d_\Gamma(\hat{x}, \hat{y})$.

Observación 4. Para cada $g \in \mathcal{G}$, denotemos por $\phi_g : \Gamma_{met} \rightarrow \Gamma_{met}$ a la función $\phi_g(\tilde{x}) = g\tilde{x}$, con $\tilde{x} \in \Gamma_{met}$. De acuerdo con la definición de grafo periódico, ϕ_g es una función continua. Ahora, notemos que para cada $\tilde{x} \in \Gamma_{met}$:

$$(\phi_g \circ \phi_{g^{-1}})(\tilde{x}) = g(g^{-1}\tilde{x}) = (gg^{-1})\tilde{x} = e\tilde{x} = \tilde{x},$$

y de forma análoga $(\phi_{g^{-1}} \circ \phi_g)(\tilde{x}) = \tilde{x}$. Entonces $(\phi_g)^{-1} = \phi_{g^{-1}}$, y de acuerdo con la definición 36, $\phi_{g^{-1}}$ también es una función continua. Entonces ϕ_g es un homeomorfismo.

Usualmente se suele denotar $gU = \phi_g(U)$, para $U \subset \Gamma_{met}$.

Uno de los puntos importantes en la definición es la co-compacidad de la acción de \mathcal{G} sobre Γ_{met} . Intuitivamente, significa que el grafo Γ_{met} se obtiene a partir de “trasladados” de un cierto subconjunto Γ_0 . Para probar esto, requerimos el siguiente lema.

Lema 8. Γ_{met} es un espacio localmente compacto.

Demostración. Sea $\tilde{x} \in \Gamma_{met}$ y $b \in \mathcal{B}$ tal que $\tilde{x} \in J_b$. Consideramos 2 casos:

Caso 1: $\tilde{x} \notin \mathcal{V}_{met}$. En este caso, $x \in J_b^\circ = (\varphi_b([0, \ell(b)]))^\circ = \varphi_b((0, \ell(b)))$ (pues φ_b es un homeomorfismo entre J_b y $[0, \ell(b)]$). Así J_b° es una vecindad de \tilde{x} y $\overline{J_b^\circ} = \varphi_b([0, \ell(b)]) = J_b$, el cual es compacto.

Caso 2: $\tilde{x} \in \mathcal{V}_{met}$. Ahora consideremos:

$$U = \left(\bigcup_{b \in \mathcal{B}_{\tilde{x}}} J_b \right) \setminus \{\tilde{v} \in \mathcal{V}_{met} \mid v \sim \tilde{x}\} = \left(\bigcup_{b \in \overrightarrow{\mathcal{B}_{\tilde{x}}}} \varphi_b((0, \ell(b))) \right) \cup \left(\bigcup_{b \in \overleftarrow{\mathcal{B}_{\tilde{x}}}} \varphi_b([0, \ell(b))) \right)$$

(i.e., se está considerando el “grafo estrella” centrado en \tilde{x} sin los vértices exteriores).

Para cada $b \in \mathcal{B}$, los conjuntos $(0, \ell(b)], [0, \ell(b)) \in \tau_{[0, \ell(b)]}$, con lo cual $\varphi_b((0, \ell(b))), \varphi_b([0, \ell(b))) \in \tau_\Gamma$, de modo que $U \in \tau_\Gamma$. Como la union anterior es finita tenemos que:

$$\overline{U} = \left(\bigcup_{b \in \overrightarrow{\mathcal{B}_{\tilde{x}}}} \overline{\varphi_b((0, \ell(b)))} \right) \cup \left(\bigcup_{b \in \overleftarrow{\mathcal{B}_{\tilde{x}}}} \overline{\varphi_b([0, \ell(b)))} \right) = \bigcup_{b \in \mathcal{B}_{\tilde{x}}} J_b$$

el cual es compacto.

Entonces cada punto $\tilde{x} \in \Gamma_{met}$ tiene una vecindad con clausura compacta. $\therefore \Gamma_{met}$ es localmente compacto. **Q.E.D.**

Por simplicidad, denotaremos $\Gamma/\mathcal{G} = \Gamma_{met}/\mathcal{G}$

Lema 9. Si Γ es un grafo métrico periódico y \mathcal{G} el grupo que actúa sobre él, entonces la proyección

$$\begin{aligned} \pi : \Gamma_{met} &\rightarrow \Gamma/\mathcal{G} \\ \tilde{x} &\mapsto \mathcal{O}_{\tilde{x}} \end{aligned}$$

es una función abierta.

Demostración. Usaremos la siguiente caracterización de la topología cociente: $V \in \tau_{\Gamma/\mathcal{G}}$ si y sólo si $\bigcup_{\mathcal{O}_{\tilde{x}} \in V} \mathcal{O}_{\tilde{x}} \in \tau_\Gamma$ (véase [29]).

Sea $U \in \tau_\Gamma$. Notemos que

$$\begin{aligned} \bigcup_{\mathcal{O}_{\tilde{x}} \in \pi(U)} \mathcal{O}_{\tilde{x}} &= \bigcup_{\tilde{x} \in U} \mathcal{O}_{\tilde{x}} \\ &= \bigcup_{\tilde{x} \in U} \{g\tilde{x} \mid g \in \mathcal{G}\} \\ &= \bigcup_{\tilde{x} \in U} \bigcup_{g \in \mathcal{G}} \{g\tilde{x}\} \\ &= \bigcup_{g \in \mathcal{G}} \bigcup_{\tilde{x} \in U} \{g\tilde{x}\} \\ &= \bigcup_{g \in \mathcal{G}} gU \end{aligned}$$

El mapeo $\tilde{x} \mapsto g\tilde{x}$ es un homeomorfismo y $U \in \tau_\Gamma$, entonces $gU \in \tau_\Gamma$ para cada $g \in \mathcal{G}$, luego $\bigcup_{\mathcal{O}_{\tilde{x}} \in \pi(U)} \mathcal{O}_{\tilde{x}} = \bigcup_{g \in \mathcal{G}} gU \in \tau_\Gamma$, con lo cual $\pi(U) \in \tau_{\Gamma/\mathcal{G}}$, de modo que π es una función abierta. **Q.E.D.**

Teorema 27. Sea Γ un grafo métrico periódico y \mathcal{G} el grupo que actúa sobre él. Entonces existe $\Gamma_1 \subset \Gamma_{met}$ compacto tal que:

$$\Gamma_{met} = \bigcup_{g \in \mathcal{G}} g\Gamma_1. \quad (4.2)$$

Demostración. Escojamos un conjunto \mathcal{A} tal que contenga exactamente un representante de clase de cada $\mathcal{O}_{\tilde{x}} \in \Gamma/\mathcal{G}$ (esto siempre es posible por el axioma de elección). Por ser Γ_{met} localmente compacto, cada $\tilde{x} \in \mathcal{A}$ posee una vecindad $U_{\tilde{x}}$ con clausura compacta. Ahora bien,

$$\Gamma/\mathcal{G} = \bigcup_{\mathcal{O}_{\tilde{x}} \in \Gamma/\mathcal{G}} \{\mathcal{O}_{\tilde{x}}\} = \bigcup_{\tilde{x} \in \mathcal{A}} \{\mathcal{O}_{\tilde{x}}\} \subset \bigcup_{\tilde{x} \in \mathcal{A}} \pi(U_{\tilde{x}}).$$

Por ser π una función abierta, la colección $\{\pi(U_{\tilde{x}})\}_{\tilde{x} \in \mathcal{A}}$ es una cubierta abierta para Γ/\mathcal{G} . Por la compacidad de Γ/\mathcal{G} , podemos tomar $\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n \in \mathcal{A}$ de tal manera que

$$\Gamma/\mathcal{G} \subset \bigcup_{j=1}^n \pi(U_{\tilde{x}_j}).$$

Ahora definamos:

$$\Gamma_1 := \bigcup_{j=1}^n \overline{U_{\tilde{x}_j}}.$$

Como cada $\overline{U_{\tilde{x}_j}}$ es compacto, se tiene que Γ_1 es compacto. Queremos probar que $\Gamma_{met} = \bigcup_{g \in \mathcal{G}} g\Gamma_1$. Claramente $\bigcup_{g \in \mathcal{G}} g\Gamma_1 \subset \Gamma_{met}$ por lo que sólo resta ver la otra contención.

Sea $\tilde{x} \in \Gamma_{met}$, entonces existe $j \in \{1, \dots, n\}$ tal que $\mathcal{O}_{\tilde{x}} \in \pi(U_{\tilde{x}_j})$, de modo que $\mathcal{O}_{\tilde{x}} = \mathcal{O}_{\tilde{y}}$, para algún $\tilde{y} \in U_{\tilde{x}_j} \subset \overline{U_{\tilde{x}_j}}$. Como $\mathcal{O}_{\tilde{x}} = \mathcal{O}_{\tilde{y}}$, debe existir $g \in \mathcal{G}$ tal que $\tilde{x} = g\tilde{y}$, con lo cual $\tilde{x} \in g\overline{U_{\tilde{x}_j}} \subset g\Gamma_1$.

Como \tilde{x} era arbitrario, se tiene que $\Gamma_{met} \subset \bigcup_{g \in \mathcal{G}} g\Gamma_1$. **Q.E.D.**

Intuitivamente lo que el teorema 27 establece es que Γ_{met} puede obtenerse “trasladando” el conjunto Γ_1 . Por supuesto, Γ_1 no es único, y existen diferentes maneras de escoger tal conjunto. Más que en el conjunto Γ_1 , estamos interesados en un conjunto Γ_0 que satisfaga las siguientes condiciones:

1. Γ_0 es conexo.
2. $\overline{\Gamma_0}$ es un compacto que satisface (4.2).
3. $\forall g, h \in \mathcal{G} \quad g \neq h \Rightarrow (g\Gamma_0) \cap (h\Gamma_0) = \emptyset$.

Un conjunto Γ_0 que satisfaga tales condiciones se denomina un **dominio fundamental**.

De la demostración del teorema 27, notamos que $\Gamma/\mathcal{G} \subset \pi(\Gamma_1)$, y como Γ_1 es compacto y genera todo Γ_{met} , entonces sólo debe contener un número finito de vértices. Entonces, sólo hay un número finito de clases correspondientes a vértices.

Sean $\{\mathcal{U}_1, \dots, \mathcal{U}_m\} \subset \Gamma/\mathcal{G}$ las clases correspondientes a los vértices. Tómesese $\tilde{v}_1 \in \mathcal{V}_{met}$ tal que $\pi(\tilde{v}_1) = \mathcal{U}_1$. Escojase ahora $\tilde{v}_2 \in \mathcal{V}_{met}$ tal que \tilde{v}_2 es adyacente a \tilde{v}_1 , pero

$\pi(\tilde{v}_1) \cap \pi(\tilde{v}_2) = \emptyset$. Hacemos esto hasta encontrar vértices $\tilde{v}_2, \dots, \tilde{v}_p$ adyacentes a \tilde{v}_1 , pero tales que $\pi(\tilde{v}_1) \cap \pi(\tilde{v}_j) = \emptyset$, $j = \overline{2, p}$. Luego repetimos el proceso para cada \tilde{v}_j , $j = \overline{1, p}$ hasta agotar todas las clases de vértices. De este modo, nuestros vértices $\tilde{v}_1, \dots, \tilde{v}_m$ estarán conectados.

Como siguiente paso, para \tilde{v}_1 , tomamos la colección \mathcal{B}_1 de todas las aristas en \mathcal{B}_{v_1} que no están relacionados entre ellos, i.e., si $b, c \in \mathcal{B}_1$, entonces no existe un $g \in \mathcal{G}$ tal que $J_b = gJ_c$ (es claro que este conjunto debe contener al menos una arista). En el siguiente paso, para \tilde{v}_2 , denotamos:

$$\mathcal{B}_2 := \{b \in \mathcal{B}_{\tilde{v}_2} \mid \forall c \in \mathcal{B}_1 \cup (\mathcal{B}_{\tilde{v}_2} \setminus \{b\}) \nexists g \in \mathcal{G} : J_b = gJ_c\}.$$

Continuando con este proceso obtenemos una colección de conjuntos de aristas $\mathcal{B}_1, \dots, \mathcal{B}_m$ tales que $\mathcal{B}_j \subset \mathcal{B}_{\tilde{v}_j}$, $j = \overline{1, m}$ y ninguna arista de \mathcal{B}_j está relacionado con las aristas de $\mathcal{B}_1, \dots, \mathcal{B}_{j-1}$, y las aristas de \mathcal{B}_j no están relacionadas entre sí. De este modo, nuestro candidato para dominio fundamental es

$$\Gamma_0 := \bigcup_{j=1}^m \left(\left(\bigcup_{b \in \mathcal{B}_j} J_b^\circ \right) \cup \{\tilde{v}_j\} \right).$$

Por construcción, Γ_0 es conexo, además por ser una union finita

$$\overline{\Gamma_0} = \bigcup_{j=1}^m \overline{\left(\left(\bigcup_{b \in \mathcal{B}_j} J_b^\circ \right) \cup \{\tilde{v}_j\} \right)} = \bigcup_{j=1}^m \bigcup_{b \in \mathcal{B}_j} J_b$$

el cual es compacto.

La elección de los vértices v_1, \dots, v_m y las colecciones de aristas $\mathcal{B}_1, \dots, \mathcal{B}_m$, garantiza que ningún elemento de Γ_0 está relacionado entre sí.

Ahora, sean $g, h \in \mathcal{G}$ tales que existe $\tilde{x} \in (g\Gamma_0) \cap (h\Gamma_0)$. Entonces existen $\tilde{y}, \tilde{z} \in \Gamma_0$ tales que, $g\tilde{y} = \tilde{x} = h\tilde{z}$, con lo cual $\tilde{y} = g^{-1}h\tilde{z}$. Esto sólo puede ocurrir si $\tilde{y} = \tilde{z}$. Así $\tilde{y} = g^{-1}h\tilde{y}$, pero la acción de \mathcal{G} es fiel, luego $g^{-1}h = e$, con lo cual $g = h$. Entonces los traslados de Γ_0 son ajenos entre sí.

Por último, sea $\tilde{x} \in \Gamma_{met}$. Si $\tilde{x} \in \mathcal{V}_{met}$, entonces $\pi(\tilde{x}) = \pi(\tilde{v}_j)$, para algún $j \in \{1, \dots, m\}$, con lo cual $\tilde{x} \in g\Gamma_0$.

Suponga ahora que $\tilde{x} \notin \mathcal{V}_{met}$, y escogemos algún $b \in \mathcal{B}$ para el cual $\tilde{x} \in J_b$. Tómesese $\tilde{v} \in \{o(\tilde{b}), \tilde{o}(\tilde{b})\}$, entonces, como en el caso anterior, existe $\tilde{v}_j \in \Gamma_0$ y $g \in \mathcal{G}$ tal que $\tilde{v} = g\tilde{v}_j$. Por definición de grafo periódico, la acción de \mathcal{G} preserva aristas, con lo cual $J_b = gJ_c$, con $c \in \mathcal{B}_{\tilde{v}_j}$. Si $c \in \mathcal{B}_j$, se tiene que $\tilde{x} \in g\Gamma_0$, en caso contrario, existe $J_d \in \Gamma_0$ y $h \in \mathcal{G}$ tales que $J_c = hJ_d$. Entonces $J_b = ghJ_d$ y $\tilde{x} \in gh\Gamma_0$.

En conclusión $\Gamma_{met} = \bigcup_{g \in \mathcal{G}} g\Gamma_0$ con lo cual tenemos el siguiente teorema.

Teorema 28. *Cualquier grafo periódico Γ posee un dominio fundamental Γ_0 que satisface:*

$$\Gamma_{met} = \bigcup_{g \in \mathcal{G}} g\Gamma_0.$$

Por supuesto, existen diferentes formas de tomar al dominio fundamental Γ_0 . Notemos que el dominio Γ_0 contiene exactamente un representante de clase de cada elemento de Γ/\mathcal{G} , entonces podemos considerar la función $\tilde{\pi} = \pi \circ \iota$, donde $\iota : \Gamma_0 \hookrightarrow \Gamma_{met}$ es la inclusión, como puede verse en el siguiente diagrama

$$\begin{array}{ccc} \Gamma_0 & & \\ \downarrow \iota & \searrow \tilde{\pi} & \\ \Gamma_{met} & \xrightarrow{\pi} & \Gamma/\mathcal{G} \end{array}$$

La función $\tilde{\pi}$ es biyectiva y continua.

4.2. Grafos encajados en \mathbb{R}^n

Como hemos visto en ejemplos anteriores, Γ_{met} no siempre es un subconjunto de algún \mathbb{R}^n . Sin embargo, en muchos ejemplos prácticos es suficiente considerar grafos *encajados* en algún espacio \mathbb{R}^n (véase [22, 3]). Por supuesto, los grafos no necesariamente tienen que estar encajados en \mathbb{R}^2 (a menos que sean planos). Siguiendo los procedimientos estandar, se define un grafo métrico encajado en \mathbb{R}^n de la siguiente manera:

Definición 37. Sea $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{B})$ un grafo dirigido. Diremos que Γ **está encajado en** \mathbb{R}^n , si se cumplen las siguientes condiciones:

- (i) $\mathcal{V} \subset \mathbb{R}^n$.
- (i) Si $b \in \mathcal{B}$ y $v = o(b), w = t(b)$, entonces

$$b = [v, w] := \{(1-t)v + tw \mid t \in [0, 1]\}.$$

- (ii) Si $b, c \in \mathcal{B}$, $b \neq c$, y $b \cap c \neq \emptyset$, entonces $b \cap c = \{v\}$, con $v \in \mathcal{V}$.

En este caso denotamos $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$.

Usualmente se suele interpretar $\Gamma = \bigcup_{b \in \mathcal{B}} b$, de modo que en efecto, $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$. Por supuesto, esta definición es aplicable para grafos no dirigidos, tomando cada arista $e = [v, w]$, donde v, w son incidentes en e .

Podemos considerar a Γ como un espacio métrico, simplemente utilizando la métrica inducida de \mathbb{R}^n . Ahora, Γ se considera un grafo métrico en el sentido de la definición 18, tomando la función de longitud $\ell : \mathcal{B} \rightarrow [0, +\infty)$ de la siguiente manera:

$$\ell(b) := \|o(b) - t(b)\|_n, \quad b \in \mathcal{B},$$

donde $\|\cdot\|_n$ es la norma usual en \mathbb{R}^n . Notemos que cada arista $b = [v, w]$ es isométrica al intervalo $[0, \ell(b)]$: en efecto, consideremos la función $\chi_b : [0, \ell(b)] \rightarrow b$ dada por:

$$\chi_b(t) := \left(1 - \frac{t}{\ell(b)}\right)v + \frac{t}{\ell(b)}w, \quad t \in [0, \ell(b)].$$

Si $s, t \in [0, \ell(b)]$ tenemos:

$$\begin{aligned} \|\chi_b(t) - \chi_b(s)\|_n &= \left\| \left(\left(1 - \frac{t}{\ell(b)}\right)v + \frac{t}{\ell(b)}w \right) - \left(\left(1 - \frac{s}{\ell(b)}\right)v + \frac{s}{\ell(b)}w \right) \right\|_n \\ &= \left\| \frac{s-t}{\ell(b)}(w-v) \right\|_n \\ &= |t-s|. \end{aligned}$$

Ahora consideremos el espacio Γ_{met} construido mediante el procedimiento del capítulo 2. Sea $J_b \subset \Gamma_{met}$ la arista métrica asociada a b . Como J_b es isométrica a $[0, \ell(b)]$, entonces J_b y b son isométricos, y la isometría es $\chi_b \circ \varphi_b^{-1} : J_b \rightarrow b$. Ahora definamos $\Psi : \Gamma_{met} \rightarrow \Gamma$ dado por

$$\Psi((b, x)^\sim) = \chi_b(\varphi_b^{-1}((b, x)^\sim)), \quad \text{para } (b, x)^\sim \in \Gamma_{met}.$$

Notemos que Ψ está bien definida y es continua en $\Gamma_{met} \setminus \mathcal{V}_{met}$. Ahora, si $(b, x)^\sim$ corresponde a la clase del vértice v , tomamos 2 representantes de clase $(b, x), (c, y)$. Si $(b, x) = (b, 0)$ y $(c, y) = (c, \ell(c))$, entonces $\chi_b(\varphi_b^{-1}((b, 0)^\sim)) = \chi_b(0) = v$, y de igual forma $\chi_c(\varphi_c^{-1}((c, \ell(c))^\sim)) = \chi_c(\ell(c)) = v$. Procediendo de forma análoga para los otros casos, se tiene que Ψ está bien definida y es continua en cada vértice v . Además, se puede ver que Ψ es invertible y su inversa es continua, con lo cual Γ y Γ_{met} son homeomorfos.

Entonces, en lo que resta, trabajaremos con el espacio Γ , en lugar de Γ_{met} .

Nuestro interés se centra ahora en el siguiente tipo de grafo periódico. Sea $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^n$ un grupo bajo la suma vectorial, tal que $\mathcal{G} \simeq \mathbb{Z}^m$, con $m \leq n$, y sean $\{e_1, \dots, e_m\} \subset \mathbb{R}^n$ vectores linealmente independientes tales que

$$\mathcal{G} = \left\{ \sum_{j=1}^m \alpha_j e_j \mid \alpha_j \in \mathbb{Z}, j = \overline{1, m} \right\}. \quad (4.3)$$

Supondremos que la acción de \mathcal{G} sobre Γ está dada por traslaciones:

$$\begin{aligned} \mathcal{G} \times \Gamma &\rightarrow \Gamma \\ (g, x) &\mapsto g + x \end{aligned}$$

donde el $+$ denota la suma usual en \mathbb{R}^n . Tal acción debe satisfacer los requisitos de la definición 36. De aquí en adelante, todos los grafos periódicos en consideración estarán dados de esta manera.

Introducimos ahora el concepto de *zona de Brillouin*, que será de utilidad en las secciones posteriores.

Definición 38. Sea $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^n$ un grupo dado por (4.3). Definimos el **lattice dual** (o *recíproco*) de \mathcal{G} como

$$\mathcal{G}^* := \{g' \in \mathbb{R}^n \mid \forall g \in \mathcal{G} \ g \cdot g' \in 2\pi\mathbb{Z}\}. \quad (4.4)$$

(Aquí \cdot denota el producto interno usual en \mathbb{R}^n).

Es sencillo ver que \mathcal{G}^* es un subgrupo de \mathbb{R}^n con la suma vectorial. Entonces podemos considerar el grupo cociente $\mathbb{R}^n/\mathcal{G}^*$.

Ejemplo 5. Sea $\mathcal{G} = \{(\alpha_1, \dots, \alpha_m, 0, \dots, 0) \mid \alpha_j \in \mathbb{Z}, j = \overline{1, m}\}$. Un cálculo sencillo muestra que $\mathcal{G}^* = 2\pi\mathbb{Z}^n$.

Ahora bien, el grupo cociente $\mathbb{R}^n/(2\pi\mathbb{Z}^n)$ puede ser identificado con la región $[-\pi, \pi)^n$ (aunque también con $[0, 2\pi)^n$).

Como en el ejemplo anterior, resulta que el grupo cociente \mathbb{R}/\mathcal{G}^* puede ser identificado con una región $\mathbb{G}^* \subset \mathbb{R}^n$, la cual es conexa y acotada. Se define entonces la **zona de Brillouin** de \mathcal{G} como $\mathbb{B} = \overline{\mathbb{G}^*}$.¹

La zona de Brillouin \mathbb{B} es un conjunto conexo y compacto, y sus elementos $\theta \in \mathbb{B}$ se denominan *quasi-momentos*.

Por último, es conveniente considerar aquellos grafos que cumplen con la siguiente condición:

$$\forall x, y \in \Gamma \quad \lim_{\mathcal{G} \ni g \rightarrow \infty} d_\Gamma(x, y + g) = \infty. \quad (4.5)$$

Esto quiere decir que los trasladados $y + g$ de cualquier punto $y \in \Gamma$ tienden a infinito para g suficientemente grande.

Ejemplo 6. Consideremos el grafo $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{B})$ donde

$$\mathcal{V} = \{(n, 0) \mid n \in \mathbb{Z}\} \cup \{(n, 1) \mid n \in \mathbb{Z}\} \text{ y}$$

$$\mathcal{B} = \{[(n, 0), (n, 1)], [(n, 0), (n + 1, 0)], [(n, 1), (n + 1, 1)], [(n + 1, 0), (n + 1, 1)] \mid n \in \mathbb{Z}\}$$

como se puede ver en la parte derecha de la figura 4.1. El grupo que actúa sobre Γ es generado por $e_1 = (1, 0)$, i.e., $\mathcal{G} = \{\alpha e_1 \mid \alpha \in \mathbb{Z}\}$.

Un dominio fundamental puede ser escogido como la región sombreada en rojo de la figura 4.1. Γ_0 consta de los vértices v_1, v_2 y las aristas b_1, b_2, b_3 .

Ahora, un punto $(x, y) \in \mathcal{G}^*$ debe satisfacer: $(x, y) \cdot \alpha e_1 \in 2\pi\mathbb{Z}, \forall \alpha \in \mathbb{Z}$, que es equivalente a que $\alpha x \in 2\pi\mathbb{Z}, \forall \alpha \in \mathbb{Z}$. En particular, tomando $\alpha = 1$ tenemos que $x \in 2\pi\mathbb{Z}$, luego

$$\mathcal{G}^* = \{(x, y) \mid x \in 2\pi\mathbb{Z}\} = (2\pi\mathbb{Z}) \times \mathbb{R}.$$

Dado $x \in \mathbb{R}$, siempre existe un único $\xi \in [-\pi, \pi)$ tal que $x - \pi \in 2\pi\mathbb{Z}$, de modo que $(x, y) - (\xi, 0) \in (2\pi\mathbb{Z}) \times \mathbb{R}$, con lo cual podemos identificar $(2\pi\mathbb{Z}) \times \mathbb{R}$ con $[-\pi, \pi) \times \{0\}$. Luego, podemos tomar $\mathbb{B} = [-\pi, \pi] \times \{0\}$, la cual se muestra de color verde en la parte izquierda de la figura 4.1.

4.3. Descomposición de Bloch del hamiltoniano y estructura *band-gap* del espectro

Ahora consideremos a Γ como un grafo cuántico, cuyo hamiltoniano $\mathcal{H} : \mathcal{D}(\mathcal{H}) \subset L^2(\Gamma) \rightarrow L^2(\Gamma)$ está dado por el operador de Schrödinger

$$\mathcal{H}u := (-u_b'' + q_b u_b)_{b \in \mathcal{B}},$$

¹Dado que $\mathcal{G} \simeq \mathbb{Z}^m$, algunos autores toman $\mathbb{B} = [-\pi, \pi]^n$ (véase [22]).

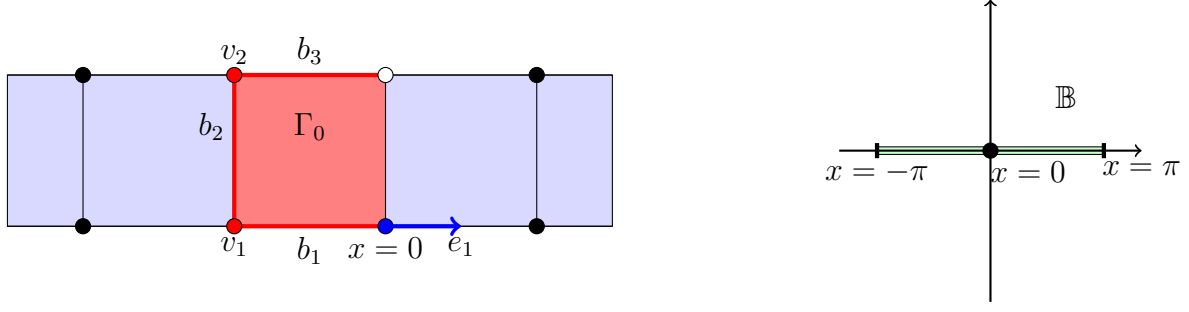


Figura 4.1: Banda \mathbb{Z} -periódica (izquierda) y su zona de Brillouine (derecha) $\mathbb{B} = [-\pi, \pi] \times \{0\}$.

con un potencial $q \in L^\infty(\Gamma)$ de valor real, y cuyo dominio $\mathcal{D}(\mathcal{H})$ son todas las colecciones de funciones $u \in H^2(\Gamma)$ que satisfacen las condiciones de N-K.

Sabemos ya por los teoremas 20 y 2 que \mathcal{H} es autoadjunto en $L^2(\Gamma)$ y $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) \subset \mathbb{R}$.

Si Γ es un grafo periódico, donde el grupo \mathcal{G} que actúa en Γ está dado por (4.3), entonces la acción del grupo debe conmutar con el hamiltoniano, i.e.

1. Si $b \in \mathcal{B}$, entonces $\mathcal{H}u_b = \mathcal{H}u_{b+g}$.
2. Si $v \in \mathcal{V}$ y u satisface la condición de N-K en v , entonces satisface la misma condición en $v + g$.

Esto implica que el potencial q debe ser “generado” por una familia finita de potenciales (q_1, \dots, q_r) (recordemos que Γ/\mathcal{G} tiene un número finito de clases de vértices). Entonces, si

$$m_q = \min_{j=1,r} (-\|q_j\|_{L^\infty[0,\ell(b_j)]}),$$

se sigue del teorema 23 que $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) \subset [m_q, +\infty)$.

Sin embargo, no podemos garantizar que $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ sea puramente discreto o puntual, pues Γ no es compacto. Sin embargo, análogo a como el teorema de Sturm-Liouville generalizó el teorema clásico para la ecuación de Schrödinger en un intervalo compacto, lo que se buscará es encontrar un análogo a la teoría de la ecuación de Schrödinger periódica en \mathbb{R} .

Con el fin de simplificar nuestra notación, y considerando que las familias de funciones contenidas en el dominio del operador de Schrödinger satisfacen la condición de continuidad (de modo que definen funciones legítimas en Γ) se usará la notación funcional $u(x)$ para el valor común de la familia u en cada punto $x \in \Gamma$, y denotaremos la acción del operador de Schrödinger como

$$\mathcal{H}u(x) = -\frac{d^2}{dx^2}u(x) + q(x)u(x), \quad x \in \Gamma \setminus \mathcal{V}.$$

Ejemplo 7. Sea $\Gamma = (\mathcal{V}, \mathcal{B})$ el grafo encajado en \mathbb{R} , tal que $\mathcal{V} = \mathbb{Z}$ y $\mathcal{E} = \{[n, n+1] \mid n \in \mathbb{Z}\}$. Sobre Γ actúa el grupo $G = \mathbb{Z}$ por medio de traslaciones, y un dominio fundamental está dado por $\Gamma_0 = (\{v_0\}, \{b_0\})$, el cual se muestra señalado en color rojo en la figura 4.2.

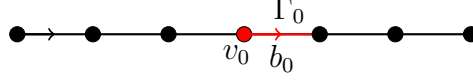


Figura 4.2: Grafo Γ periódico homomorfo a \mathbb{R} .

Consideremos el operador de Schrödinger \mathcal{H} con un potencial $q \in L^\infty(\Gamma)$ periódico. Notemos que la familia q define casi en todo punto, una función $q_0 \in L^\infty(\mathbb{R})$ \mathbb{Z} -periódica, i.e., que:

$$\forall x \in \mathbb{R} \forall m \in \mathbb{Z} \quad q_0(x + m) = q_0(x).$$

Además, la condición de Kirchoff en cada vértice v se reduce a la condición de las derivadas direccionales de una función en dicho punto. De este modo, el problema de calcular el espectro de \mathcal{H} se reduce a calcular el espectro del operador Schrödinger $H = -\frac{d^2}{dx^2} + q_0(x)$ en $L^2(\mathbb{R})$.

4.3.1. Teoría de Floquet para la ecuación de Hill

Sea $q_0 \in L^\infty(\mathbb{R})$ una función de valor real \mathbb{Z} -periódica, i.e., que

$$\forall x \in \mathbb{R} \forall \alpha \in \mathbb{Z} \quad q_0(x + \alpha) = q_0(x).$$

Consideramos entonces la *ecuación de Hill* dada por:

$$-u'' + q_0(x)u = \lambda u, \quad x \in \mathbb{R}, \lambda \in \mathbb{C}.$$

donde las soluciones $u \in L^2(\mathbb{R})$. Una forma de analizar esta ecuación es mediante la *teoría de Floquet*, la cual emplea la periodicidad del potencial q_0 para reducir el problema anterior al intervalo $[0, 1]$.

Tomemos $\theta \in \mathbb{R}$, y consideremos el *problema de Bloch*

$$H^\theta = \begin{cases} -u'' + q_0(x)u = \lambda u, & x \in (0, 1), \\ u(x + m) = e^{i\theta \cdot m}u(x), & x = 0, 1; \forall m \in \mathbb{Z} \end{cases}$$

La condición de frontera anterior se conoce como *condición cíclica de Bloch*, y se reduce simplemente a:

$$\forall m \in \mathbb{Z} \quad u(m) = e^{i\theta \cdot m}u(0).$$

Además, si $u \in L^2[0, 1]$ es una solución del problema de Bloch anterior, la condición cíclica permite extender u a todo \mathbb{R} , de tal manera que:

$$\forall m \in \mathbb{Z} \forall x \in \mathbb{R} \quad u(x + m) = e^{i\theta \cdot m}u(x). \quad (4.6)$$

Por supuesto, la extensión $\tilde{u} \notin L^2(\mathbb{R})$, pero $\tilde{u} \in L^2_{loc}(\mathbb{R})$. Al considerar la extensión \tilde{u} , al problema de Bloch se le puede agregar la condición en la derivada:

$$\forall m \in \mathbb{Z} \quad u'(m) = e^{i\theta \cdot m}u'(0).$$

Por el teorema de Sturm-Liouville, el problema de Bloch con condiciones cíclicas tiene espectro discreto $\mathfrak{S}(H^\theta)$ y los valores propios satisfacen:

$$\lambda_0(\theta) < \lambda_1(\theta) < \dots$$

Ahora, para cada $\theta \in \mathbb{R}$ realizamos el mismo proceso, con lo cual obtenemos una familia de problemas de Bloch $\{H^\theta\}_{\theta \in \mathbb{R}}$. Sin embargo, la única diferencia entre 2 problemas es la condición cíclica, con lo cual, dados $\theta, \phi \in \mathbb{R}$, estos definen el mismo problema de Bloch si y sólo si:

$$\forall m \in \mathbb{Z} \quad e^{i\theta \cdot m} = e^{i\phi \cdot m},$$

lo cual ocurre si y sólo si $\theta - \phi \in 2\pi\mathbb{Z}$. Esto quiere decir que θ y ϕ pertenecen a la misma clase en $\mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}$. Puesto que éste cociente puede identificarse con $[-\pi, \pi)$, basta sólo considerar los problemas $\{H^\theta\}_{\theta \in [-\pi, \pi)}$.

Resulta que el espectro del problema original H puede descomponerse en los espectros de los problemas de Bloch H^θ :

$$\mathfrak{S}(H) = \bigcup_{\theta \in [-\pi, \pi)} \mathfrak{S}(H^\theta).$$

De hecho, $\mathfrak{S}(H) = \mathfrak{S}_c(H)$. La demostración de estos hechos puede encontrarse en [9, cap. 6].

Tomemos ahora $j \in \mathbb{N}_0$, y asociemos a cada $\theta \in [-\pi, \pi)$ el j -ésimo valor propio $\lambda_j(\theta)$ del problema de Bloch H^θ . Entonces podemos ver a $\lambda_j : [-\pi, \pi) \rightarrow \mathbb{R}$ como una función. De hecho en [9] se demuestra que las funciones λ_j son *continuas* en $[-\pi, \pi)$. Entonces $\lambda_j([-\pi, \pi)) = [\alpha_j, \beta_j]$ para $j \in \mathbb{N}_0$, y estos intervalos son llamados “bandas espectrales”. Luego, debido a la descomposición de $\mathfrak{S}(H)$ se tiene

$$\mathfrak{S}(H) = \bigcup_{j=0}^{\infty} [\alpha_j, \beta_j].$$

Esta descomposición recibe el nombre de *representación de bandas-estrechos* (ó *band-gap* en inglés). Se puede demostrar también que

$$\mathbb{R} \setminus \mathfrak{S}(H) = \bigcup_{j=1}^{\infty} (a_j, b_j),$$

y los intervalos (a_j, b_j) reciben el nombre de “estrechos” (*gaps* en inglés).

De este modo, el problema de calcular el espectro $\mathfrak{S}(H)$ del problema “total”, se reduce a calcular el espectro de los problemas de Bloch. Con esta idea en mente, generalizamos este proceso para los grafos periódicos.

4.3.2. Teoría de Floquet para grafos periódicos

Basados en la teoría de Floquet para la ecuación de Hill, procedemos a estudiar ciertos operadores definidos en el dominio fundamental $\Gamma_0 = (\mathcal{V}_0, \mathcal{B}_0)$. Como Γ_0 y $\overline{\Gamma}_0$ difieren por un conjunto de medida cero, entonces $L^2(\Gamma_0) = L^2(\overline{\Gamma}_0)$ y $H^2(\Gamma_0) = H^2(\overline{\Gamma}_0)$, de manera que nuestros operadores serán considerados sobre Γ_0 .

Definimos los siguientes espacios auxiliares:

$$L_{loc}^2(\Gamma) := \prod_{b \in \mathcal{B}} L^2[0, \ell(b)] \quad \text{y} \quad H_{loc}^2(\Gamma) := \prod_{b \in \mathcal{B}} H^2(0, \ell(b)).$$

La siguiente definición es una generalización de los problemas cíclicos de Bloch de la ecuación de Hill.

Definición 39. Sea $\theta \in \mathbb{R}^n$. El **hamiltoniano de Bloch** asociado a θ , es el operador $\mathcal{H}^\theta : \mathcal{D}(\mathcal{H}^\theta) \subset L^2(\Gamma_0) \rightarrow L^2(\Gamma_0)$, que actúa como el operador de Schrödinger

$$\mathcal{H}u = (-u'' + q_b u_b)_{b \in \mathcal{B}_0}$$

y cuyo dominio $\mathcal{D}(\mathcal{H}^\theta)$ consta de todas las $u \in H^2(\Gamma_0)$ para las cuales, existe una función $\tilde{u} \in H_{loc}^2(\Gamma)$ tal que $\tilde{u}|_{\Gamma_0} = u$, y que satisface las condiciones de N-K, así como la siguiente *condición cíclica de Bloch*:

$$\forall x \in \Gamma \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad \tilde{u}(x + g) = e^{i\theta \cdot g} \tilde{u}(x).^2 \quad (4.7)$$

De hecho, las condiciones cíclicas y las de N-K pueden ser reescritas como condiciones en los vértices de Γ_0 , y cualquier función $u \in H^2(\Gamma_0)$ que satisfaga dichas condiciones puede ser extendida a una función $\tilde{u} \in H_{loc}^2(\Gamma)$ que satisface la condición cíclica (4.7). Más aún, se puede demostrar que tales condiciones dan lugar a que el operador \mathcal{H}^θ sea autoadjunto.

Proposición 18. $\forall \theta \in \mathbb{R}^n$ \mathcal{H}^θ es un operador autoadjunto en $L^2(\Gamma_0)$.

La demostración puede verse en [6, cap. 4]. Como Γ_0 es un grafo finito, se sigue del teorema de Sturm-Liouville para grafos compactos que $\mathfrak{S}(\mathcal{H}^\theta) = \mathfrak{S}_d(\mathcal{H}^\theta) \subset \mathbb{R}$ y sus valores propios forman una sucesión

$$\lambda_0(\theta) < \lambda_1(\theta) < \dots < \lambda_j(\theta) < \dots$$

tal que $\lambda_j(\theta) \rightarrow +\infty$, $j \rightarrow \infty$.

Ahora notemos que dados $\theta, \phi \in \mathbb{R}^n$, los respectivos hamiltonianos de Bloch difieren únicamente de la exponencial en la condición cíclica, de modo que $\mathcal{H}^\theta = \mathcal{H}^\phi$ si y sólo si

$$e^{i\theta \cdot g} = e^{i\phi \cdot g} \Leftrightarrow e^{i(\theta - \phi) \cdot g} = 1 \Leftrightarrow (\theta - \phi) \cdot g \in 2\pi\mathbb{Z}, \quad \forall g \in \mathcal{G}$$

Esto equivale a decir que $\theta - \phi \in \mathcal{G}^*$, de modo que $\mathcal{H}^\theta = \mathcal{H}^\phi$ si y sólo si θ y ϕ pertenecen a la misma clase de $\mathbb{R}^n / \mathcal{G}^*$. Entonces, es suficiente considerar los hamiltonianos de Bloch $\{\mathcal{H}^\theta\}_{\theta \in \mathbb{B}}$.

Sea $j \in \mathbb{N}_0$. Notemos que a cada $\theta \in \mathbb{B}$ podemos asociarle el j -ésimo valor propio $\lambda_j(\theta)$ del hamiltoniano \mathcal{H}^θ . Esta correspondencia define una función $\lambda_j : \mathbb{B} \rightarrow \mathbb{R}$. Estas funciones son llamadas en algunos trabajos *relaciones de dispersión*. Al igual que en el caso de la ecuación de Hill, se tiene el siguiente resultado.

²Por simplicidad, aquí se utiliza esta notación funcional, pues por las condiciones de N-K \tilde{u} define una función en Γ .

Proposición 19. $\forall j \in \mathbb{B}$, $\lambda_j : \mathbb{B} \rightarrow \mathbb{R}$ es una función continua.

La demostración puede verse en [6, cap. 4].

Si tomamos una constante M_q que satisfaga la condición (3.27), como por ejemplo $M_q = -\sup_{b \in \mathbb{B}_0} \|q_b\|_{L^\infty[0, \ell(b)]}$, entonces $\mathfrak{S}(\mathcal{H}^\theta) \subset [M_q, +\infty), \forall \theta \in \mathbb{B}$, de modo que cada función λ_j está acotada inferiormente por M_q . Más aún, por la continuidad de λ_j y la compacidad de \mathbb{B} , se tiene que $\lambda_j(\mathbb{B}) = [\alpha_j, \beta_j]$. Estos intervalos son conocidos como *bandas de dispersión* o *variedades de Bloch*.

Al igual que en el caso de la ecuación de Hill, los hamiltonianos de Bloch permiten descomponer el espectro del hamiltoniano “total” \mathcal{H} .

Teorema 29. Sea \mathcal{H} el hamiltoniano con potencial periódico $q \in L^\infty(\Gamma)$ de valor real, que actúa como el operador de Schrödinger y cuyo dominio consiste de todas las funciones $u \in H^2(\Gamma)$ que satisfacen las condiciones de N-K. Entonces

$$\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \bigcup_{\theta \in \mathbb{B}} \mathfrak{S}_d(\mathcal{H}^\theta) = \bigcup_{j=0}^{\infty} [\alpha_j, \beta_j]. \quad (4.8)$$

Las ideas de la demostración pueden encontrarse en [6, cap. 4]. Como consecuencia de la representación *band-gap* del espectro, este no tiene puntos aislados, con lo cual se tiene el siguiente corolario, que muestra un contraste con el caso de un grafo finito.

Corolario 5. $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \mathfrak{S}_{ess}(\mathcal{H})$.

Nota. Esto **no** implica que $\mathfrak{S}_p(\mathcal{H}) = \emptyset$.

La importancia del teorema 29, es que reduce el cálculo del espectro $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ al cálculo de los espectros $\mathfrak{S}_d(\mathcal{H}^\theta)$. El interés será entonces desarrollar técnicas para calcular los espectros $\mathfrak{S}_d(\mathcal{H}^\theta)$, las cuales veremos en el siguiente capítulo.

Comentarios y observaciones

En este capítulo hemos analizado algunos aspectos de la teoría de grafos cuánticos periódicos. Las definiciones y resultados principales de la teoría general son tomados del capítulo 4 de [6], mientras que los resultados para grafos encajados en \mathbb{R}^n se basan en algunas definiciones y resultados presentados en [22, 3]. Cabe recalcar que, aunque hemos considerado a los grafos encajados $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$ como espacios métricos, empleando la métrica inducida por \mathbb{R}^n , también es posible emplear la longitud de arco para definir la distancia entre dos puntos del grafo. Incluso se puede construir una métrica similar a la de Γ_{met} .

También es importante comentar que nosotros hemos manejado la definición de dominio fundamental Γ_0 , de tal manera que $\partial\Gamma_0$ contenga vértices. No obstante, existen algunos trabajos en los cuales se emplean dominios fundamentales que no contengan vértices en la frontera, como por ejemplo [5], sin embargo, los resultados básicos de la descomposición de Bloch siguen siendo los mismos.

En este capítulo hemos presentado algunos elementos de la teoría de Floquet-Bloch para la ecuación de Hill, los cuales pueden ser encontrados en [9]. Con respecto a la teoría

de Floquet para grafos periódicos, hemos hecho una recopilación de los resultados más importantes y que serán de utilidad para el capítulo 5. Cabe mencionar que las pruebas de tales resultados requieren de herramientas matemáticas más sofisticadas, por lo que decidimos excluirlas. Sin embargo, es importante mencionar que la descomposición de Bloch se basa en la idea de la **transformada de Floquet**, la cual es una generalización de la transformada de Fourier, extendida para grafos periódicos. Esta transformada está dada por:

$$\tilde{f}(x, \theta) = \sum_{g \in \mathcal{G}} f(x + g) e^{-ig \cdot \theta}, \quad x \in \Gamma, \theta \in \mathbb{R}^n,$$

y se define primero para funciones $f \in L^2(\Gamma)$ de soporte compacto. Resulta que la transformada de Floquet es una isometría, por lo cual puede extenderse a una isometría definida en todo $L^2(\Gamma)$. Si denotamos por \mathcal{F} a tal operador, resulta que al aplicar la transformada de Floquet al hamiltoniano \mathcal{H} , se obtiene una descomposición en forma de una “integral directa”:

$$\mathcal{F} \mathcal{H} \mathcal{F}^{-1} = \int_{\mathbb{B}}^{\oplus} \mathcal{H}^{\theta} d\theta,$$

y de esta descomposición se deduce el hecho de que $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \bigcup_{\theta \in \mathbb{B}} \mathfrak{S}(\mathcal{H}^{\theta})$.

Las demostraciones de estos resultados pueden encontrarse en [6, 22].

Ecuación de dispersión para un grafo periódico

Si alguien no cree que las matemáticas son simples, es porque no entiende lo complicada que es la vida

John Vonn Neumann
(1903–1957)

En el capítulo anterior se observó que el cálculo del espectro $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ de un grafo periódico $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$, se reduce al cálculo de los espectros $\mathfrak{S}_d(\mathcal{H}^\theta)$ de los hamiltonianos de Bloch, los cuales están definidos en un dominio fundamental Γ_0 previamente escogido.

En este capítulo, analizaremos algunas técnicas para calcular el espectro de los hamiltonianos de Bloch, y como caracterizar los valores propios mediante una ecuación de dispersión.

5.1. Problema espectral con potencial simétrico en un intervalo

Antes de calcular una ecuación de dispersión para nuestro grafo Γ , repasaremos algunos hechos relacionados con el problema de Sturm-Liouville con un potencial simétrico en un intervalo $[0, \ell]$.

Definición 40. Una función $q : [0, \ell] \rightarrow \mathbb{C}$ se dice:

(i) **Simétrica** en $[0, \ell]$ si

$$\forall x \in [0, \ell] \quad q(x) = q(\ell - x).$$

(ii) **Anti-simétrica** en $[0, \ell]$ si

$$\forall x \in [0, \ell] \quad q(x) = -q(\ell - x).$$

En toda esta sección, consideramos un potencial $q_0 \in C[0, \ell]$ de valor real y **simétrico**.

Asociamos a tal potencial el *operador de Dirichlet* $H^D : \mathcal{D}(H^D) \subset L^2[0, \ell] \rightarrow L^2[0, \ell]$ cuya acción está dada por el operador de Schrödinger:

$$H^D u(x) = -\frac{d^2}{dx^2} u(x) + q_0(x)u(x), \quad 0 < x < \ell,$$

y cuyo dominio es

$$\mathcal{D}(H^D) := \{u \in H^2(0, \ell) \mid u(0) = u(\ell) = 0\} = H_0^2(0, \ell).$$

Como el potencial q_0 es de valor real, se tiene que el operador H^D es auto-adjunto en $L^2[0, \ell]$, por lo cual, del teorema de Sturm-Liouville, $\mathfrak{S}(H^D) = \mathfrak{S}_d(H^D) \subset \mathbb{R}$, y los valores propios son simples y forman una sucesión creciente:

$$m_q \leq \lambda_0 < \lambda_1 < \dots$$

donde $m_q := \inf_{x \in [0, \ell]} q_0(x)$. De este modo el espectro coincide con los valores propios del problema de Sturm-Liouville:

$$-u''(x) + q_0(x)u(x) = \lambda u(x), \quad 0 < x < \ell, \quad \lambda \in \mathbb{C} \quad (5.1)$$

con condiciones de frontera

$$u(0) = u(\ell) = 0. \quad (5.2)$$

Ahora estamos interesados por las propiedades que las funciones propias heredan del potencial simétrico q_0 . Para esto introducimos el siguiente operador.

Definición 41. Definimos el operador **de reversión** $\mathcal{R} : L^2[0, \ell] \rightarrow L^2[0, \ell]$ dado por:

$$\mathcal{R}u(x) = u(\ell - x), \quad x \in [0, \ell].$$

Observemos que la definición de que q sea simétrica (anti-simétrica) equivale a decir que $q = \mathcal{R}q$ ($= -\mathcal{R}q$)

Observación 5. El operador \mathcal{R} satisface las siguientes propiedades:

- (i) \mathcal{R} es una isometría en $L^2[0, \ell]$ y $\mathcal{R}^{-1} = \mathcal{R}$.
- (ii) $\frac{d}{dx} \mathcal{R} = -\mathcal{R} \frac{d}{dx}$ y $\frac{d^2}{dx^2} \mathcal{R} = \mathcal{R} \frac{d^2}{dx^2}$.
- (iii) $\mathcal{D}(H^D)$ es invariante bajo \mathcal{R} .
- (iv) Por la simetría del potencial q_0 , se tiene que $H^D \mathcal{R} = \mathcal{R} H^D$.
- (v) Si $\lambda \in \mathfrak{S}_d(H^D)$ y $\psi_\lambda \in E_\lambda(H^D)$, entonces:

$$H^D \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda \Rightarrow \mathcal{R}(H^D \psi_\lambda) = \mathcal{R}(\lambda \psi_\lambda) \Rightarrow H^D(\mathcal{R} \psi_\lambda) = \lambda(\mathcal{R} \psi_\lambda),$$

de modo que $\mathcal{R} \psi_\lambda \in E_\lambda(H^D)$.

Ahora veamos que las funciones propias de H^D heredan ciertas propiedades del potencial q_0 .

Lema 10. *Cualquier función propia del operador H^D , es simétrica o bien anti-simétrica.*

Demostración. Sean $\lambda \in \mathfrak{S}_d(H^D)$ y $\psi_\lambda \in E_\lambda(H^D)$. Por la observación 5 (v), $\mathcal{R}\psi_\lambda \in E_\lambda(H^D)$, y como λ es simple, debe existir $a \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ tal que $\psi_\lambda = a\mathcal{R}\psi_\lambda$. Ahora bien

$$\mathcal{R}\psi_\lambda = a\mathcal{R}^2\psi_\lambda = a\psi_\lambda$$

de modo que

$$\psi_\lambda = a\mathcal{R}\psi_\lambda = a^2\psi_\lambda.$$

Entonces $a^2 = 1$ con lo cual $a = \pm 1$ y $\psi_\lambda = \pm\mathcal{R}\psi_\lambda$, esto es, ψ_λ es simétrica o bien anti-simétrica. **Q.E.D.**

Observación 6. *Sea $\lambda \in \mathfrak{S}_d(H^D)$ y $\psi_\lambda \in E_\lambda(H^D)$.*

(i) *Si ψ_λ es simétrica, entonces:*

$$\frac{d}{dx}\psi_\lambda = \frac{d}{dx}\mathcal{R}\psi_\lambda = -\mathcal{R}\frac{d}{dx}\psi_\lambda$$

con lo cual:

$$\psi'_\lambda(0) = -\psi'_\lambda(\ell). \quad (5.3)$$

(i) *Si ψ_λ es anti-simétrica, entonces:*

$$\frac{d}{dx}\psi_\lambda = -\frac{d}{dx}\mathcal{R}\psi_\lambda = \mathcal{R}\frac{d}{dx}\psi_\lambda$$

con lo cual:

$$\psi'_\lambda(0) = \psi'_\lambda(\ell). \quad (5.4)$$

Ahora analizamos algunas propiedades de la ecuación de Schrödinger simétrica (5.1).

Supongamos que $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}(H^D)$. Entonces la ecuación (5.1) tiene dos soluciones $\varphi_0(\lambda, x)$ y $\varphi_1(\lambda, x)$ que satisfacen las siguientes condiciones:

$$\varphi_0(\lambda, 0) = 1, \quad \varphi_0(\lambda, \ell) = 0, \quad (5.5)$$

$$\varphi_1(\lambda, 0) = 0, \quad \varphi_1(\lambda, \ell) = 1. \quad (5.6)$$

Como $\varphi_1(\lambda, x) \not\equiv 0$, y $\varphi_1(\lambda, 0) = 0$, entonces $\varphi'_2(\lambda, 0) \neq 0$ (de lo contrario, el teorema de existencia y unicidad implicaría que $\varphi_1(\lambda, x) \equiv 0$). Es bien conocido que el Wronskiano de la ecuación (5.1) es constante, de modo que

$$W(\varphi_0(\lambda, x), \varphi_1(\lambda, x)) = \begin{vmatrix} \varphi_0(\lambda, 0) & \varphi'_0(\lambda, 0) \\ \varphi_1(\lambda, 0) & \varphi'_1(\lambda, 0) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & \varphi'_0(\lambda, 0) \\ 0 & \varphi'_1(\lambda, 0) \end{vmatrix} = \varphi'_1(\lambda, 0) \neq 0.$$

Entonces $\{\varphi_0(\lambda, x), \varphi_1(\lambda, x)\}$ es un conjunto fundamental de soluciones para (5.1). Más aún, por la condición de simetría en el potencial se tiene la siguiente relación:

Proposición 20. Sean $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}(H^D)$, y $\{\varphi_0(\lambda, x), \varphi_1(\lambda, x)\}$ las soluciones de la ecuación (5.1) que satisfacen las condiciones de frontera (5.5), (5.6). Entonces se satisfacen las siguientes condiciones en las derivadas:

$$\varphi_1'(\lambda, 0) = -\varphi_0'(\lambda, \ell), \quad (5.7)$$

$$\varphi_1'(\lambda, \ell) = -\varphi_0'(\lambda, 0). \quad (5.8)$$

Demostración. Evaluando el Wronskiano de las funciones $\varphi_0(\lambda, x), \varphi_1(\lambda, x)$ en $x = 0$

$$W(\varphi_0(\lambda, 0), \varphi_1(\lambda, 0)) = \begin{vmatrix} \varphi_0(\lambda, 0) & \varphi_0'(\lambda, 0) \\ \varphi_1(\lambda, 0) & \varphi_1'(\lambda, 0) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & \varphi_0'(\lambda, 0) \\ 0 & \varphi_1'(\lambda, 0) \end{vmatrix} = \varphi_1'(\lambda, 0),$$

y en $x = \ell$

$$W(\varphi_0(\lambda, \ell), \varphi_1(\lambda, \ell)) = \begin{vmatrix} \varphi_0(\lambda, \ell) & \varphi_0'(\lambda, \ell) \\ \varphi_1(\lambda, \ell) & \varphi_1'(\lambda, \ell) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & \varphi_0'(\lambda, 0) \\ 1 & \varphi_1'(\lambda, 0) \end{vmatrix} = -\varphi_0'(\lambda, 0),$$

y usando el hecho de que éste es constante, se tiene que $\varphi_1'(\lambda, 0) = -\varphi_0'(\lambda, \ell)$.

Para la segunda igualdad, por ser el potencial q_0 simétrico y $\varphi_0(\lambda, x)$ solución de (5.1), $\mathcal{R}\varphi_0(\lambda, x)$ también es solución de (5.1). Consideremos ahora $g(\lambda, x) = \varphi_1(\lambda, x) - \mathcal{R}\varphi_0(\lambda, x)$. Notemos que g es una solución de (5.1) que satisface:

$$g(0) = \varphi_1(\lambda, 0) - \mathcal{R}\varphi_0(\lambda, 0) = 0 - \varphi_0(\lambda, \ell) = 0,$$

$$g'(0) = \varphi_1'(\lambda, 0) - (\mathcal{R}\varphi_0)'(\lambda, 0) = \varphi_1'(\lambda, 0) + \varphi_0'(\lambda, \ell) = 0,$$

por la igualdad (5.7). Entonces por el teorema de existencia y unicidad $g \equiv 0$, con lo cual $\varphi_1(\lambda, x) = \mathcal{R}\varphi_0(\lambda, x)$. Luego:

$$\varphi_1'(\lambda, \ell) = \left. \frac{d}{dx} \right|_{x=\ell} \varphi_0(\lambda, \ell - x) = -\varphi_0'(\lambda, 0).$$

Q.E.D.

Notemos que para cada $\lambda \in \mathbb{C}$, las condiciones (5.5) y (5.6) son holomorfas en λ , de modo que las soluciones $\varphi_0(\lambda, x)$ y $\varphi_1(\lambda, x)$, vistas como funciones de λ , son enteras (véase [12, cap. 1]). Ahora bien, para $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}(H^D)$ hemos visto que $\varphi_1'(\lambda, 0) \neq 0$, de modo que la función

$$\eta(\lambda) := \frac{\varphi_1'(\lambda, \ell)}{\varphi_1'(\lambda, 0)} \quad (5.9)$$

es holomorfa en $\mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}(H^D)$. Como veremos mas adelante, la función η jugará un papel fundamental en el cálculo del espectro de un grafo cuántico periódico.

5.2. Ecuación de dispersión para un grafo equilátero y equipotencial

Consideremos un grafo cuántico $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$ sobre el cual actúa el grupo

$$\mathcal{G} = \left\{ \sum_{j=1}^m \alpha_j e_j, \left| \alpha_j \in \mathbb{Z}, j = \overline{1, m} \right. \right\},$$

por medio de traslaciones, con $\{e_1, \dots, e_m\}$ linealmente independientes. Sea $\Gamma_0 \subset \Gamma$ un dominio fundamental dado, y denotemos $\mathcal{V}_0 = \mathcal{V} \cap \Gamma_0 = \{v_1, \dots, v_r\}$.

Supondremos durante esta sección que el grafo Γ es *equilateral*, cuyas aristas tienen longitud $\ell > 0$. Consideremos $q_0 \in C[0, \ell]$ de valor real y simétrico, de modo que ésta define una función continua en Γ (pues satisface la condición de continuidad). Más aún, la familia $q = (q_b)_{b \in \mathcal{B}}$ dada por $q_b = q_0$, para cada $b \in \mathcal{B}$, pertenece a $L^\infty(\Gamma)$ con $\|q\|_{L^\infty(\Gamma)} = \max_{x \in [0, \ell]} |q_0(x)|$. Supondremos ahora que el hamiltoniano de Γ está dado por el operador de Schrödinger:

$$\mathcal{H}u(x) = -\frac{d^2}{dx^2}u(x) + q(x)u(x), \quad x \in \Gamma \setminus \mathcal{V},$$

cuyo dominio son todas las familia $u \in H^2(\Gamma)$ que satisfacen las condiciones de N-K. En este caso, decimos que el grafo cuántico Γ es **equipotencial**.

Denotemos por $\overleftarrow{\Gamma}$ al grafo obtenido de Γ invirtiendo las direcciones de las aristas, y sea \mathcal{RH} el operador de Schrödinger en $\overleftarrow{\Gamma}$, con potencial generador por $\mathcal{R}q_0$, y dominio $\mathcal{D}(\mathcal{RH})$ formado por las funciones en $H^2(\overleftarrow{\Gamma})$ que satisfacen las condiciones de N-K.

Como q_0 es simétrico, el operador \mathcal{RH} actúa exactamente como \mathcal{H} en cada arista de $\overleftarrow{\Gamma}$. Ahora, si $u = (u_b) \in H^2(\Gamma)$, entonces $\mathcal{R}u = (\mathcal{R}u_b) \in H^2(\overleftarrow{\Gamma})$. Notemos además que la condición de continuidad es independiente de la dirección de las aristas, por lo cual, si u es continua en Γ , entonces $\mathcal{R}u$ es continua en $\overleftarrow{\Gamma}$. Por otro lado, si u satisface la condición de Kirchhoff en un vértice v de Γ , $\mathcal{R}u$ en dicho vértice (pero visto como elemento de $\overleftarrow{\Gamma}$) satisface:

$$\sum_{b \in \mathcal{B}_v} (\mathcal{R}u_b)'(v) = -\sum_{b \in \mathcal{B}_v} u_b'(v) = 0,$$

de manera que $\mathcal{R}u$ también satisface la condición de Kirchhoff. Así, $u \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$ si y sólo si, $\mathcal{R}u \in \mathcal{D}(\mathcal{RH})$.

Debido a esto, decimos que el operador de Schrödinger con potencial simétrico es *independiente de la dirección de las aristas*, con lo cual podemos ajustar las direcciones de las aristas cada vez que sea necesario.

Por el teorema (20), \mathcal{H} es autoadjunto, y como $m_q = \inf_{x \in [0, \ell]} q_0(x)$ satisface (3.27), se sigue de la proposición (15) que $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) \subset [m_q, +\infty)$. Además, de la teoría de Floquet sabemos que $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \bigcup_{\theta \in \mathbb{B}} \mathfrak{S}(\mathcal{H}^\theta)$, donde \mathcal{H}^θ es el hamiltoniano de Bloch asociado al quasimomento $\theta \in \mathbb{B}$. También sabemos que el espectro de cada hamiltoniano de Bloch consiste de valores propios de multiplicidad finita

$$m_q \leq \lambda_0(\theta) < \lambda_1(\theta) < \dots$$

con $\lambda_j(\theta) \rightarrow \infty, j \rightarrow \infty$. La idea ahora es encontrar un método para calcular tales valores propios.

El método que será presentado a continuación fue desarrollado primeramente para el grafo del grafeno en [22], y generalizado para grafos unilaterales en [31, 3], aunque este procedimiento es válido para grafos equilaterales, como veremos a continuación.

Introducimos la siguiente notación:

$$v_j^{(\pm k)} := v_j \pm e_k, \quad j = \overline{1, r}, k = \overline{1, m}$$

i.e., cada $v_j^{(\pm k)}$ representa un traslado del vértice v_j en el dominio fundamental, por uno de los generadores e_k . Usando un abuso de notación podemos definir $v_j^{(0)} := v_j$, y si denotamos $e_{-k} := -e_k$, podemos escribir $v_j^{(k)}$, para $j = \overline{1, n}, k = \overline{-m, m}$.

Denotamos ahora:

$$a_{i,j}(k) := [v_i, v_j^{(k)}], \quad i, j = \overline{1, r}, k = \overline{-m, m}$$

a la arista que une el vértice $v_i \in \mathcal{V}_0$ con el trasladado $v_j^{(k)}$.

Ahora supondremos que el dominio fundamental satisface la siguiente condición, usada también en [31, 3]:

Si $e \in \mathcal{B}_0$, entonces existen $v_i, v_j \in \mathcal{V}_0$ y $k \in \{-m, \dots, m\}$ tales que $e = a_{i,j}(k)$.

(La mayoría de los ejemplos prácticos cumplen esta condición, por lo que es suficiente para nuestros propósitos).

Tomemos $\theta \in \mathbb{B}$. Notemos que para calcular el espectro $\mathfrak{S}_d(\mathcal{H}^\theta)$ es necesario resolver el problema de Sturm-Liouville:

$$\mathcal{H}^\theta u = \lambda u \tag{5.10}$$

para $u \in H_{loc}^2(\Gamma)$ que satisfaga las condiciones de N-K y la condición cíclica de Bloch:

$$\forall x \in \Gamma \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad u(x + g) = e^{ig \cdot \theta} u(x).$$

La restricción de u en Γ_0 será la función propio asociada a λ .

Como el hamiltoniano \mathcal{H}^θ es invariante bajo la acción de \mathcal{G} , es suficiente considerar las condiciones para los vértices \mathcal{V}_0 .

Sea $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}_d(H^D)$, $u \in H_{loc}^2(\Gamma)$ que satisfice la ec. (5.10) (i.e., que sus componentes satisfacen la ec. de Schrödinger simétrica (5.1) en $[0, \ell]$) y $\varphi_0(\lambda, x), \varphi_1(\lambda, x)$ las soluciones de (5.1) que satisfacen las condiciones (5.5), (5.6).

Tómese $v_i \in \mathcal{V}_0$ y considere la restricción $u_{a_{i,j}(k)}$, $j = \overline{1, r}, k = \overline{-m, m}$, con la arista $a_{i,j}(k)$ orientada hacia fuera de v_i (por supuesto, se excluye la arista $a_{i,i}(0)$). Como $u_{a_{i,j}(k)}$ es una solución de la ec. (5.1) en $[0, \ell]$, puede escribirse como:

$$u_{a_{i,j}(k)}(x) = c_1 \varphi_0(\lambda, x) + c_2 \varphi_1(\lambda, x),$$

para algunas constantes $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$, que determinaremos a continuación.

Evaluando en $x = 0$ tenemos por las propiedades de $\varphi_0(\lambda, x), \varphi_1(\lambda, x)$ que

$$u_{a_{i,j}(k)}(0) = c_1 \varphi_0(\lambda, 0) + c_2 \varphi_1(\lambda, 0) = c_1.$$

Por la condición de continuidad, $u(v_i)$ está bien definido y $u(v_i) = u_{a_{i,j}(k)}(v_i) = u_{a_{i,j}(k)}(0)$, de modo que $c_1 = u(v_i)$.

Ahora evaluamos en $x = \ell$:

$$u_{a_{i,j}(k)}(\ell) = c_1\varphi_0(\lambda, \ell) + c_2\varphi_1(\lambda, \ell) = c_2.$$

Nuevamente, por la condición de continuidad $u(v_j^{(k)})$ está bien definido y $u(v_j^{(k)}) = u_{a_{i,j}(k)}(v_j^{(k)}) = u_{a_{i,j}(k)}(\ell) = c_2$. Sin embargo, u debe satisfacer la condición cíclica de Bloch, con lo cual:

$$c_2 = u(v_j^{(k)}) = u(v_j + e_k) = e^{ie_k \cdot \theta} u(v_j) = e^{i\theta_k} u(v_j),$$

donde $\theta_k := e_k \cdot \theta$. Entonces:

$$u_{a_{i,j}(k)} = u(v_i)\varphi_0 + e^{i\theta_k} u(v_j)\varphi_1, \quad j = \overline{1, r}, k = \overline{-m, m}. \quad (5.11)$$

Ahora aplicamos la condición de Kirchoff a u en v_i . Por hipótesis, \mathcal{B}_{v_i} consta de aristas de la forma $a_{i,j}(k) := [v_i, v_j^{(k)}]$, con lo cual la condición de Kirchoff puede ser escrita de la siguiente forma:

$$\sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} u'_{a_{i,j}(k)}(0) = 0,$$

donde el símbolo $v_j^{(k)} \sim v_i$ indica que la suma se toma sobre los $k = \overline{-m, m}$ para los cuales el vértice $v_j^{(k)}$ es adyacente a v_i .

Empleando (5.11) se tiene que:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} (u(v_i)\varphi'_0(\lambda, 0) + e^{i\theta_k} u(v_j)\varphi'_1(\lambda, 0)) \\ (\text{Por (5.8)}) &= \sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} (-u(v_i)\varphi'_1(\lambda, \ell) + e^{i\theta_k} u(v_j)\varphi'_1(\lambda, 0)) \\ (\text{Dividiendo entre } \varphi'_1(\lambda, 0)) &= \sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} \left(-u(v_i) \frac{\varphi'_1(\lambda, \ell)}{\varphi'_1(\lambda, 0)} + e^{i\theta_k} u(v_j) \right) \\ (\text{Por (5.9)}) &= \sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} (-u(v_i)\eta(\lambda) + e^{i\theta_k} u(v_j)). \end{aligned}$$

Realizando el mismo procedimiento para $i = \overline{1, r}$ obtenemos un sistema de r ecuaciones con r incógnitas $u(v_1), \dots, u(v_r)$ de la forma:

$$\sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} (-u(v_i)\eta(\lambda) + e^{i\theta_k} u(v_j)) = 0, \quad i = \overline{1, r}.$$

Desarrollando esta ecuación se obtiene:

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} (-u(v_i)\eta(\lambda) + e^{i\theta_k}u(v_j)) &= -\sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} u(v_i)\eta(\lambda) + \sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k}u(v_j) \\
&= -d_{v_i}\eta(\lambda)u(v_i) + \sum_{j=1}^r \left(\sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \right) u(v_j) \\
&= \sum_{j=1}^r \left(-d_{v_j}\eta(\lambda)\delta_{i,j} + \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \right) u(v_j).
\end{aligned}$$

Así, nuestro sistema de ecuaciones toma la forma:

$$\sum_{j=1}^r \left(-d_{v_j}\eta(\lambda)\delta_{i,j} + \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \right) u(v_j) = 0, \quad i = \overline{1, r}. \quad (5.12)$$

Si el sistema anterior sólo tuviera la solución trivial, entonces $u(v_j) = 0$, para $j = \overline{1, r}$, pero entonces, en cada arista $a_{i,j}(k)$, $u_{a_{i,j}(k)}(0) = u_{a_{i,j}(k)}(\ell) = 0$, lo cual contradice que $\lambda \notin \mathfrak{S}(H^D)$. De este modo, el sistema tiene soluciones no triviales $u(v_1), \dots, u(v_r)$.

Denotando $S(\lambda, \eta)$ a la matriz del sistema (5.12), la condición anterior es equivalente a que $\det S(\lambda, \theta) = 0$. Notemos que el elemento i, j -ésimo de la matriz $S(\lambda, \theta)$ es:

$$S(\lambda, \theta)_{i,j} = -d_{v_j}\eta(\lambda)\delta_{i,j} + \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k}.$$

Desarrollando la ecuación $\det S(\lambda, \theta) = 0$ se tiene:

$$\begin{aligned}
&\begin{vmatrix} -d_{v_1}\eta(\lambda) + \sum_{v_1^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} & \sum_{v_2^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} & \cdots & \sum_{v_r^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} \\ \sum_{v_1^{(k)} \sim v_2} e^{i\theta_k} & -d_{v_2}\eta(\lambda) + \sum_{v_2^{(k)} \sim v_2} e^{i\theta_k} & \cdots & \sum_{v_r^{(k)} \sim v_2} e^{i\theta_k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{v_1^{(k)} \sim v_r} e^{i\theta_k} & \sum_{v_2^{(k)} \sim v_r} e^{i\theta_k} & \cdots & -d_{v_r}\eta(\lambda) + \sum_{v_r^{(k)} \sim v_r} e^{i\theta_k} \end{vmatrix} = \\
&= \left(\prod_{i=1}^r d_{v_i} \right) \begin{vmatrix} -\eta(\lambda) + \frac{1}{d_{v_1}} \sum_{v_1^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} & \cdots & \frac{1}{d_{v_1}} \sum_{v_r^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{d_{v_r}} \sum_{v_1^{(k)} \sim v_r} e^{i\theta_k} & \cdots & -\eta(\lambda) + \frac{1}{d_{v_r}} \sum_{v_r^{(k)} \sim v_r} e^{i\theta_k} \end{vmatrix} \\
&= \left(\prod_{i=1}^r d_{v_i} \right) \det \left\{ -\eta(\lambda)\mathbf{1}_r + \begin{pmatrix} \frac{1}{d_{v_1}} \sum_{v_1^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} & \cdots & \frac{1}{d_{v_1}} \sum_{v_r^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{d_{v_r}} \sum_{v_1^{(k)} \sim v_r} e^{i\theta_k} & \cdots & \frac{1}{d_{v_r}} \sum_{v_r^{(k)} \sim v_r} e^{i\theta_k} \end{pmatrix} \right\}
\end{aligned}$$

Así, $\det S(\lambda, \theta) = 0$ si y sólo si

$$\det \left\{ -\eta(\lambda)\mathbf{1}_r + \begin{pmatrix} \frac{1}{d_{v_1}} \sum_{v_1^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} & \cdots & \frac{1}{d_{v_1}} \sum_{v_r^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{d_{v_r}} \sum_{v_1^{(k)} \sim v_r} e^{i\theta_k} & \cdots & \frac{1}{d_{v_r}} \sum_{v_r^{(k)} \sim v_r} e^{i\theta_k} \end{pmatrix} \right\} = 0, \quad (5.13)$$

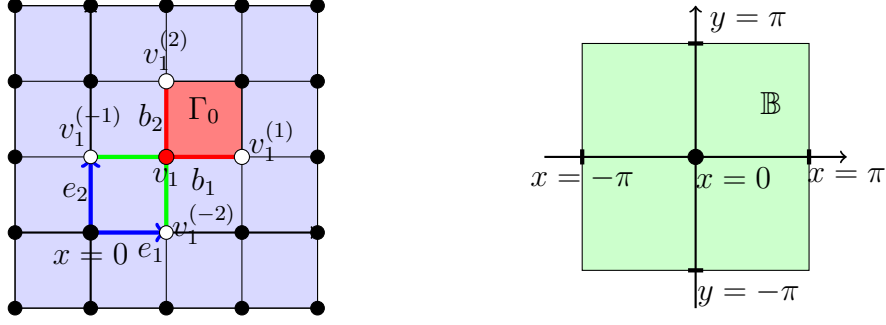


Figura 5.1: Malla cuadrática (izquierda) y su zona de Brillouine $\mathbb{Z} = [-\pi, \pi]^2$ (derecha)

donde $\mathbf{1}_r$ es la matriz identidad de $r \times r$.

Recíprocamente, si $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}(H^D)$ es solución de la ecuación anterior, entonces el sistema (5.12) posee una solución no trivial $u(v_1), \dots, u(v_r)$. Definiendo $u_{a_{i,j}(k)}$ como en (5.11) y u como la familia de dichas $u_{a_{i,j}(k)}$ y sus trasladados, se tiene que $u \in H_{loc}^2(\Gamma)$ y es una solución de $\mathcal{H}^\theta u = \lambda u$ que satisface las condiciones de N-K y la condición cíclica de Bloch. Luego $u|_{\Gamma_0} \in \mathcal{D}(\mathcal{H}^\theta)$ es una eigenfunción de \mathcal{H}^θ , de modo que $\lambda \in \mathfrak{S}(\mathcal{H}^\theta)$.

En resumen se tiene el siguiente teorema:

Teorema 30. *Dado $\theta \in \mathbb{B}$, un valor $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}(H^D)$ será un valor propio del Hamiltoniano de Bloch \mathcal{H}^θ si y sólo si, $\eta(\lambda) = f(\theta)$, donde $f(\theta)$ es un valor propio de la matriz:*

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{1}{d_{v_i}} \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \right)_{i,j=1}^r. \quad (5.14)$$

En consecuencia el espectro del Hamiltoniano \mathcal{H} dado por el operador de Schrödinger periódico satisface:

$$\mathfrak{S}(\mathcal{H}) \setminus \mathfrak{S}(H^D) = \bigcup_{\theta \in \mathbb{B}} \{\lambda \mid \eta(\lambda) = f(\theta)\}. \quad (5.15)$$

Ejemplo 8. Considere el grafo cuadrático $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$ con vértices $\mathcal{V} = \mathbb{Z}^2$ y aristas $\mathcal{B} = \{[(n, m), (n+1, m)], [(n, m), (n, m+1)] \mid m, n \in \mathbb{Z}\}$, el cual puede verse en la parte derecha de la figura 5.1. En Γ actúa el grupo $\mathcal{G} = \mathbb{Z}^2$, cuyos generadores son $e_1 = (1, 0)$, $e_2 = (0, 1)$ y aparecen como flechas de color azul en la figura 5.1. Notemos que el grafo es *unilateral*.

Un dominio fundamental $\Gamma_0 \subset \Gamma$ puede ser tomado como $\Gamma_0 = (\mathcal{V}_0, \mathcal{B}_0)$, con $\mathcal{V}_0 = \{v_1\}$ y $\mathcal{B}_0 = \{b_1, b_2\}$, como se muestra en la zona de color rojo.

Se puede comprobar que el lattice dual es $\mathcal{G}^* = 2\pi\mathbb{Z}^2$, y que una zona de Brillouine puede ser escogida como $\mathbb{B} = [-\pi, \pi]^2$, la cual se observa de color verde en la parte izquierda de la figura 5.1.

Consideremos $q_0 \equiv 0$ y el hamiltoniano $\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2}$. Aplicaremos el método desarrollado en esta sección para calcular el espectro de los hamiltonianos de Bloch.

Primero, observemos que los vértices adyacentes a v_1 son: $v_1^{(1)}, v_1^{(-1)}, v_2^{(1)}, v_2^{(-1)}$, y las correspondientes aristas incidentes son $b_1 = a_{1,1}(1), a_{1,1}(-1), b_2 = a_{1,2}(1), a_{1,2}(-1)$.

Como el grafo es unilateral, el hamiltoniano actúa en cada arista como el operador $u(x) \mapsto -u''(x)$, para $x \in (0, 1)$. Entonces, el problema H^D asociado consiste de:

$$\begin{aligned} -u''(x) &= \lambda u(x), & 0 < x < 1 \\ u(0) = u(1) &= 0. \end{aligned}$$

Es bien conocido que $\mathfrak{S}(H^D) = \{n^2\pi^2\}_{n=1}^\infty$. Si $\lambda \notin \mathfrak{S}(H^D)$, las correspondientes funciones φ_0, φ_1 tales que $\varphi_0(\lambda, 0) = 1, \varphi_0(\lambda, 1) = 0$ y $\varphi_1(\lambda, 0) = 0, \varphi_1(\lambda, 1) = 1$ son

$$\varphi_0(\lambda, x) = \frac{\sin(\sqrt{\lambda}(1-x))}{\sin\sqrt{\lambda}}, \quad \varphi_1(\lambda, x) = \frac{\sin(\sqrt{\lambda}x)}{\sin\sqrt{\lambda}}$$

Notemos que φ_0, φ_1 son holomorfas en $\mathbb{C} \setminus \{n^2\pi^2\}_{n=0}^\infty$.

De este modo, la función de dispersión $\eta(\lambda)$ está dada por

$$\eta(\lambda) = \frac{\varphi_1'(\lambda, 1)}{\varphi_1'(\lambda, 0)} = \frac{\sqrt{\lambda} \cos\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda}} = \cos\sqrt{\lambda}.$$

Tomemos $\theta = (\theta_1, \theta_2) \in \mathbb{B}$. Entonces $\lambda \in \mathfrak{S}(\mathcal{H}^\theta)$ si y sólo si, satisface la ecuación del determinante (5.13), que en este caso por tener sólo un vértice ($r = 1$), se convierte en la ecuación:

$$\eta(\lambda) = \frac{1}{4} \sum_{v_1^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} = \frac{e^{i\theta_1} + e^{-i\theta_1} + e^{i\theta_2} + e^{-i\theta_2}}{4} = \frac{\cos\theta_1 + \cos\theta_2}{2}.$$

De esta forma, la ecuación de dispersión para la malla cuadrangular es:

$$\cos\sqrt{\lambda} = \frac{\cos\theta_1 + \cos\theta_2}{2}, \quad \theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi].$$

Entonces:

$$\lambda = \left[\arccos\left(\frac{\cos\theta_1 + \cos\theta_2}{2}\right) + n\pi \right]^2, \quad n \in \mathbb{Z}, \theta_2 \in [-\pi, \pi]$$

(la función arccos se toma con rango en $[-1, 1]$). De aquí notamos que $\lambda(\theta_1, \theta_2) \geq 0, \forall \theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi]$, lo cual coincide con el estimado de que $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) \subset [0, +\infty)$. En la figura 5.2 podemos ver la superficie de dispersión correspondiente a $n = 0$.

5.3. Valores propios de multiplicidad infinita en un grafo equipotencial

Gracias al teorema 5.11 tenemos una representación para $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) \setminus \mathfrak{S}(H^D)$. Cabe ahora preguntarnos, ¿qué relación hay entre el espectro $\mathfrak{S}(H^D)$ y $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$?

Una primera respuesta para esta pregunta se encuentra en [22], donde se muestra que para el grafo unilateral del grafeno, los valores $\mathfrak{S}(H^D)$ corresponden a valores propios de $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ con *multiplicidad infinita*, y las correspondientes funciones propias son funciones cuyo soporte es compacto y consiste de un ciclo hexagonal del grafeno.

Recordemos que un ciclo en un grafo $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$ es una sucesión de vértices v_0, \dots, v_κ y una sucesión de aristas b_1, \dots, b_κ tales que:

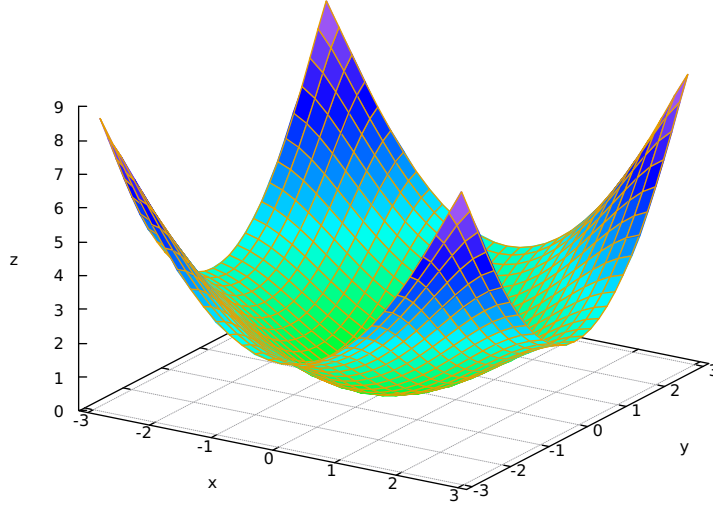


Figura 5.2: Superficie de dispersión para $n = 0$.

1. $v_0 = v_\kappa$.
2. $b_j = [v_{j-1}, v_j]$, $j = \overline{1, \kappa}$.

Además, el ciclo es simple si v_1, \dots, v_κ son distintos 2 a 2. Recordemos que el corolario 1 establece que todo ciclo contiene un subciclo simple, por lo que de aquí en adelante, sólo se trabajará con ciclos simples. Denotamos el ciclo por $\mathcal{C} = \bigcup_{j=1}^{\kappa} b_j$. Observemos que por ser ciclo simple, cualquier vértice $v_j \in \mathcal{C}$ sólo puede tener 2 aristas adyacentes contenidas en \mathcal{C} (concretamente, las aristas b_j, b_{j+1}).

Como en la mayoría de los ejemplos prácticos, siempre existe un ciclo en el grafo Γ , probaremos una generalización del resultado presentado en [22] para grafos que contienen un ciclo (no aplica entonces para árboles). Para esto, requerimos antes un pequeño lema técnico.

Lema 11. Sean \mathcal{C} y $\tilde{\mathcal{C}}$ dos ciclos simples disjuntos en Γ . Entonces existe un camino simple $\gamma \subset \Gamma$ que conecta ambos ciclos, y tal que: $\#(\mathcal{C} \cap \gamma) = \#(\tilde{\mathcal{C}} \cap \gamma) = 1$.

Demostración. Consideramos los ciclos simples $\mathcal{C} = \bigcup_{j=1}^N b_j$ y $\tilde{\mathcal{C}} = \bigcup_{k=1}^M \tilde{b}_k$, con vértices v_0, \dots, v_N y $\tilde{v}_0, \dots, \tilde{v}_M$ respectivamente. Puesto que Γ es conexo, existe un camino con vértices w_0, \dots, w_K y aristas e_1, \dots, e_K , que conecta v_0 con \tilde{v}_0 . Como $\mathcal{C} \cap \tilde{\mathcal{C}} = \emptyset$, entonces sólo una subcolección propia de los vértices w_0, \dots, w_K , está contenida en \mathcal{C} . Definamos:

$$I = \max\{0 \leq i < K \mid w_i \in \mathcal{C}\}, \quad J = \min\{I < j \leq n \mid w_j \in \tilde{\mathcal{C}}\}.$$

Observemos que $J < I$, y sea $\varrho = \bigcup_{i=I}^J d_i$, con $d_i = [w_{i-1}, w_i]$. Entonces ϱ es un camino que conecta w_I con w_J , y además, $\mathcal{C} \cap \varrho = \{w_I\}$, $\tilde{\mathcal{C}} \cap \varrho = \{w_J\}$. Por último, por el teorema 1, existe un subciclo simple γ de ϱ que conecta w_I con w_J . De este modo, γ es el ciclo simple buscado. **Q.E.D.**

Teorema 31. *Suponga que $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$ es un grafo periódico que contiene un ciclo. Entonces $\mathfrak{S}(H^D) \subset \mathfrak{S}(\mathcal{H})$, y cualquier valor $\lambda \in \mathfrak{S}(H^D)$ corresponde a un valor propio de \mathcal{H} de multiplicidad infinita.*

Demostración. Sea $\lambda \in \mathfrak{S}(H^D)$ y $\psi_\lambda \in E_\lambda(H^D)$. Por el lema 10, ψ_λ es o bien simétrica o bien anti-simétrica. Procedemos entonces por casos:

1. **Caso 1:** ψ_λ anti-simétrica. Consideremos un ciclo simple $\mathcal{C} = \bigcup_{j=1}^{\kappa} b_j$ con vértices v_0, \dots, v_κ y tomemos las aristas b_j orientadas en el sentido $b_j = [v_{j-1}, v_j]$, $j = \overline{1, \kappa}$. Definamos en cada arista, $\psi_j = \psi_\lambda$, de tal forma que $\psi_j(v_{j-1}) = \psi_\lambda(0) = 0$ y $\psi_j(v_j) = \psi_\lambda(\ell) = 0$. De este modo:

$$\psi'_j(v_{j-1}) = \psi'_\lambda(0), \quad \psi'_j(v_j) = -\psi'_\lambda(\ell) = -\psi'_\lambda(0) \quad (\text{por (5.4)}).$$

Ahora definimos la familia $\Psi = (\psi_b)$ dada por:

$$\psi_b = \begin{cases} \psi_j, & \text{si } b = b_j, j = \overline{1, \kappa}, \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Observemos que $\text{supp}(\Psi) = \mathcal{C}$ que es compacto, de modo que $\Psi \in L^2(\Gamma)$. Más aún, $\Psi \in H^2(\Gamma)$, y en cada arista del ciclo, $\psi_b = \psi_\lambda$ es solución de $-\psi''_\lambda + q_0(x)\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$, y en las demás aristas Ψ es idénticamente cero, con lo cual $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$. Puesto que $\psi_\lambda(0) = \psi_\lambda(\ell) = 0$, se tiene que $\Psi|_{\mathcal{V}} = 0$, con lo cual se satisface la condición de continuidad.

Para la condición de Kirchoff, tomemos $v \in \mathcal{V}$. Si $v \notin \mathcal{C}$, entonces $\Psi|_{\mathcal{B}_v} = 0$, por lo que la condición $\sum_{v \in \mathcal{B}_v} \psi'_b(v) = 0$ se satisface automáticamente. Por otra parte, si $v = v_j \in \mathcal{C}$ entonces:

$$\sum_{b \in \mathcal{B}_{v_j}} \psi'_b(v_j) = \psi'_j(v_j) + \psi'_{j+1}(v_j) = -\psi'_\lambda(0) + \psi'_\lambda(0) = 0.$$

Así, Ψ satisface las condiciones de N-K, con lo cual $\lambda \in \mathfrak{S}_p(\mathcal{H})$.

2. **Caso 2:** ψ_λ simétrica. Tomamos nuevamente el ciclo \mathcal{C} con la misma orientación del caso anterior. Consideramos dos casos:

Si el ciclo \mathcal{C} tiene un número **par** de vértices, definimos las funciones ψ_j de la siguiente manera: $\psi_j = (-1)^j \psi_\lambda$, $j = \overline{1, \kappa}$. De este modo:

$$\psi'_j(v_{j-1}) = (-1)^j \psi'_\lambda(0), \quad \psi'_j(v_j) = -(-1)^j \psi'_\lambda(\ell) = (-1)^j \psi'_\lambda(0) \quad (\text{Por (5.7)})$$

Definimos Ψ como en el caso anterior y nuevamente $\Psi \in H^2(\Gamma)$, $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$ y satisface la condición de continuidad. Para la condición de Kirchoff sólo necesitamos considerar $v_j \in \mathcal{C}$. Si $j = \overline{1, \kappa - 1}$:

$$\sum_{b \in \mathcal{B}_{v_j}} \psi'_b(v_j) = \psi'_j(v_j) + \psi'_{j+1}(v_j) = (-1)^j \psi'_\lambda(0) + (-1)^{j+1} \psi'_\lambda(0) = 0.$$

Por otro lado, para $j = \kappa$:

$$\sum_{b \in \mathcal{B}_{v_\kappa}} \psi'_b(v_0) = \psi'_\kappa(v_\kappa) + \psi'_1(v_\kappa) = (-1)^\kappa \psi'_\lambda(0) + \psi'_1(v_0) = \psi'_\lambda(0) - \psi'_\lambda(0) = 0,$$

pues κ es par. Así, $\Psi \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$ y $\lambda \in \mathfrak{S}_p(\mathcal{H})$.

Ahora, si \mathcal{C} tiene un número **impar** de vértices, procedemos de la siguiente manera: por la condición (4.5), podemos escoger $g \in \mathcal{G}$ de tal manera que $(\mathcal{C} + g) \cap \mathcal{C} = \emptyset$. Denotamos $\tilde{\mathcal{C}} = \mathcal{C} + g$. Así, $\tilde{\mathcal{C}} = \bigcup_{j=1}^\kappa \tilde{b}_j$ es un ciclo simple, con vértices $\tilde{v}_0, \dots, \tilde{v}_\kappa$, y es ajeno a \mathcal{C} . Por el lema 11, existe un camino simple $\gamma = \bigcup_{m=1}^M d_m$, con vértices w_0, \dots, w_M , que conecta ambos ciclos y únicamente los intersecta en un sólo vértice. Reordenando los vértices de ambos ciclos, podemos suponer que γ conecta v_0 con \tilde{v}_0 .

Ahora definimos las siguientes funciones: para las aristas b_m de \mathcal{C} , definimos:

$$\psi_j = (-1)^j \psi_\lambda, \quad j = \overline{1, \kappa},$$

para las aristas d_i de γ se define:

$$\varrho_m = (-1)^{m-1} 2\psi_\lambda, \quad m = \overline{1, M},$$

y finalmente, para las aristas \tilde{b}_i de $\tilde{\mathcal{C}}$, se define:

$$\phi_i = (-1)^{M+i-1}, \quad i = \overline{1, \kappa}.$$

A partir de estas funciones, construimos la familia $\Psi = (\Psi_b)$ dada por:

$$\Psi_b := \begin{cases} \psi_j, & \text{si } b = b_j, j = \overline{1, \kappa}, \\ \varrho_m, & \text{si } b = d_m, m = \overline{1, M}, \\ \phi_i, & \text{si } b = \tilde{b}_i, i = \overline{1, \kappa}, \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Observemos que $\text{supp}(\Psi) = \mathcal{C} \cup \gamma \cup \tilde{\mathcal{C}}$, que es compacto, con lo cual $\Psi \in L^2(\Gamma)$. Además, $\Psi \in H^2(\Gamma)$, $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$, y $\Psi|_\gamma = 0$, con lo cual satisface la condición de continuidad. Sólo resta ver que se satisface la condición de Kirchhoff. Únicamente es necesario comprobar para los vértices de $\text{supp}(\Psi)$.

Para los vértices v_j , $j = \overline{1, \kappa - 1}$, empleando las relaciones

$$\psi'_j(v_{j-1}) = (-1)^j \psi'_\lambda(0), \quad \psi'_j(v_j) = (-1)^j \psi'_\lambda(0),$$

y procediendo como en caso anterior, se obtiene la condición de Kirchhoff. Para los vértices w_m , $m = \overline{1, M - 1}$, observamos que:

$$\varrho'_m(v_{m-1}) = (-1)^{m-1} 2\psi'_\lambda(0), \quad \varrho'_m(v_m) = -(-1)^{m-1} 2\psi'_\lambda(0) = (-1)^{m-1} 2\psi'_\lambda(0) \quad (\text{Por (5.7)}),$$

de modo que para $m = \overline{1, M-1}$ se tiene:

$$\sum_{b \in \mathcal{B}_{w_m}} \Psi'_b(v_m) = \varrho'_m(w_m) + \varrho'_{m+1}(w_m) = (-1)^{m-1} 2\psi'_\lambda(0) + (-1)^m 2\psi'_\lambda(0) = 0.$$

En cuanto a los vertices \tilde{v}_i , $i = \overline{1, \kappa-1}$, se cumplen las relaciones:

$$\phi'_i(v_{i-1}) = (-1)^{M+i-1} \psi'_\lambda(0), \quad \phi'_i(v_i) = -(-1)^{M+i-1} \psi'_\lambda(\ell) = (-1)^{M+i-1} \psi'_\lambda(0) \quad (\text{Por (5.7)}),$$

con lo cual, para $i = \overline{1, \kappa-1}$ se tiene:

$$\sum_{b \in \mathcal{B}_{\tilde{v}_i}} \Psi'_b(\tilde{v}_i) = \phi'_i(v_i) + \phi'_{i+1}(v_i) = (-1)^{M+i-1} \psi'_\lambda(0) + (-1)^{M+i} \psi'_\lambda(0) = 0.$$

Por ultimo, para $v_0 = v_\kappa = w_0$ se tiene:

$$\sum_{b \in \mathcal{B}_{v_0}} \Psi_b(v_0) = \psi'_1(v_0) + \psi'_\kappa(v_\kappa) + \varrho'_1(w_0) = -\psi'_\lambda(0) + (-1)^\kappa \psi'_\lambda(0) + 2\psi'_\lambda(0) = 0,$$

pues κ es impar, mientras que para $\tilde{v}_0 = \tilde{v}_\kappa = w_M$ tenemos:

$$\begin{aligned} \sum_{b \in \mathcal{B}_{w_0}} \Psi'_b(w_0) &= \varrho'_M(w_M) + \phi'_1(\tilde{v}_0) + \phi'_\kappa(\tilde{v}_\kappa) \\ &= (-1)^{M-1} 2\psi'_\lambda(0) + (-1)^M \psi'_\lambda(0) + (-1)^{\kappa+M-1} \psi'_\lambda(0) \\ (\kappa \text{ es impar}) &= ((-1)^{M-1} 2 + (-1)^M + (-1)^M) \psi'_\lambda(0) = 0. \end{aligned}$$

Entonces, Ψ satisface las condiciones de N-K, con lo cual es una eigenfuncion de \mathcal{H} , y $\lambda \in \mathfrak{S}_p(\mathcal{H})$.

De este modo hemos probado que $\mathfrak{S}(H^D) \subset \mathfrak{S}_p(\mathcal{H})$.

Para la segunda parte, tomemos $\lambda \in \mathfrak{S}(H^D)$ y $\Psi \in E_\lambda(\mathcal{H})$ con $\text{supp}(\Psi)$ compacto, como en los casos anteriores. Dado $g \in \mathcal{G}$ definimos el *operador traslacion por g*, $V_g : L^2(\Gamma) \rightarrow L^2(\Gamma)$ dado por $V_g u(x) = u(x-g)$ y notemos que V_g es una isometria en $L^2(\Gamma)$.

Por la condicion (4.5), podemos escoger una sucesion $\{g_n\}_{n=0}^\infty \subset \mathcal{G}$ tal que $g_n \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$, y $(g_n + \text{supp}(\Psi)) \cap (g_m + \text{supp}(\Psi)) = \emptyset$, $n \neq m$.

Definimos ahora la sucesion $\{\Psi_n\}_{n=0}^\infty$ dada por $\Psi_n = V_{g_n} \Psi$. Como \mathcal{H} es periodico, $\{\Psi_n\}_{n=0}^\infty \subset E_\lambda(\mathcal{H})$ y $\text{supp}(\Psi_n) = g_n + \text{supp}(\Psi)$. Notamos que si $m \neq n$, se tiene

$$\langle \Psi_n, \Psi_m \rangle_{L^2(\Gamma)} = \int_\Gamma \Psi_n \overline{\Psi_m} dx = \int_{\text{supp}(\Psi_n)} \Psi_n \overline{\Psi_m} dx = 0.$$

De este modo la sucesion infinita $\{\Psi_n\}_{n=0}^\infty \subset E_\lambda(\mathcal{H})$ es ortogonal, y en consecuencia linealmente independiente. Luego $E_\lambda(\mathcal{H})$ tiene dimension infinita, i.e., λ es un valor propio de multiplicidad infinita. **Q.E.D.**

En conclusion, podemos ver que $\mathfrak{S}_p(\mathcal{H}) \neq \emptyset$, aun cuando $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \mathfrak{S}_{\text{ess}}(\mathcal{H})$.

Nota. Es importante recalcar que el teorema anterior sólo es válido para grafos que contienen ciclos. Por ejemplo, considere el grafo $\Gamma \subset \mathbb{R}$ del ejemplo 7, cuyos vértices son puntos de \mathbb{Z} y sus aristas son los intervalos $\mathcal{B} = \{[n, n+1] \mid n \in \mathbb{Z}\}$. Este grafo no contiene ciclos, por lo cual es imposible definir una solución $\Psi \in L^2(\Gamma)$ como en el teorema anterior. Este hecho es consistente con el resultado bien conocido de que la ecuación de Hill en \mathbb{R} tiene espectro puramente continuo (véase [9, cap. 5]).

Debemos enfatizar que el teorema 31 únicamente establece que, para grafos con ciclos, $\mathfrak{S}(H^D) \subset \mathfrak{S}_p(\mathcal{H})$, pero no podemos garantizar que ambos conjuntos sean iguales.

Ejemplo 9. En este ejemplo vamos a analizar uno de los grafos cuánticos más importantes en cuanto a aplicaciones: el grafeno. El grafeno es una sustancia compuesta por carbono puro, cuyos átomos están dispuestos en un patrón hexagonal. En la figura 5.3 puede observarse una representación del grafo de dicho elemento. Como se puede observar, Γ es un grafo \mathbb{Z}^2 -periódico sobre el cual actúa el grupo $\mathcal{G} \simeq \mathbb{Z}^2$ generado por los vectores unitarios $e_1 = (\sqrt{3}, 0)$, $e_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2}\right)$, por medio de traslaciones.

Existen varios trabajos relacionados con las propiedades de este grafo cuántico, por ejemplo [28, 22]. En este ejemplo, al igual que en [22] supondremos que el grafo es *unilateral* y *equipotencial*, con un potencial periódico generado por una función $q_0 \in C[0, 1]$ simétrica. Consideremos el caso en que $q_0 \equiv 0$ de modo que el hamiltoniano en Γ es el operador $\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2}$ cuyo dominio son las funciones $u \in H^2(\Gamma)$ que satisfacen las condiciones de N-K.

Primero, observemos que el grafo contiene ciclos hexagonales, por lo cual de acuerdo al teorema 31, el espectro $\mathfrak{S}(H^D)$ del problema:

$$-u'' = \lambda u, \quad x \in (0, 1)$$

$$u(0) = u(1) = 0,$$

pertenece a $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$. Notemos que $\mathfrak{S}(H^D) = \{n^2\pi^2\}_{n=1}^{\infty}$ y cada uno de estos valores representan valores propios de multiplicidad infinita del hamiltoniano \mathcal{H} .

Para cada $n \in \mathbb{N}$ el espacio propio es generado por la función $\psi_n(x) = \sin(n\pi x)$. Notemos que

$$\psi_n(1-x) = \sin(n\pi - n\pi x) = \sin(n\pi) \cos(n\pi x) - \sin(n\pi x) \cos(n\pi) = (-1)^{n+1} \sin(n\pi x),$$

de modo que:

$$\psi_n(1-x) = \begin{cases} \sin(n\pi x), & n \text{ impar,} \\ -\sin(n\pi x), & n \text{ par.} \end{cases}$$

entonces ψ_n es simétrica para n impar, y anti-simétrica para n par. Así, aplicando el procedimiento descrito en la demostración del teorema 31, podemos construir funciones propias Ψ con soporte en un ciclo \mathcal{C} hexagonal, partiendo de una de las funciones propias ψ_λ . En la figura 5.4, se puede observar una de tales funciones generada por una función ψ_λ anti-simétrica.

Ahora, para calcular el resto del espectro, consideremos $\lambda \notin \{n^2\pi^2\}_{n=1}^{\infty}$ y las soluciones φ_0, φ_1 de la ecuación $-u'' = \lambda u$ en $(0, 1)$ que satisfacen las condiciones $\varphi_0(\lambda, 0) =$

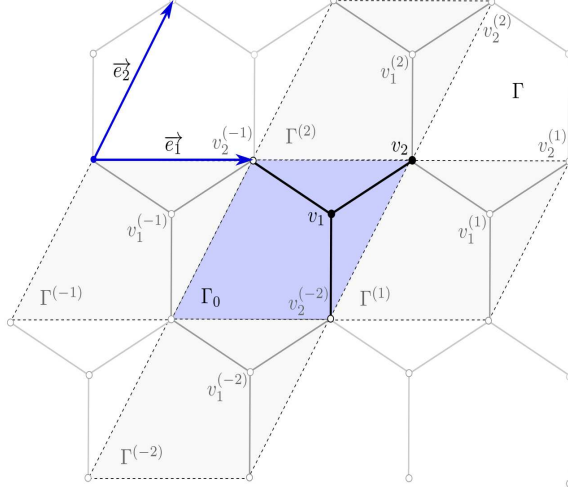


Figura 5.3: Grafo cuántico del grafeno (imagen tomada de [3, pag.9])

$\varphi_1(\lambda, 1) = 1$, y $\varphi_0(\lambda, 1) = \varphi_1(\lambda, 0) = 0$. Como se observó en ejemplos anteriores, tales funciones son:

$$\varphi_0(\lambda, x) = \frac{\sin(\sqrt{\lambda}(1-x))}{\sin \sqrt{\lambda}}, \quad \varphi_1(\lambda, x) = \frac{\sin(\sqrt{\lambda}x)}{\sin \sqrt{\lambda}}$$

y la correspondiente función de dispersión es $\eta(\lambda) = \cos \sqrt{\lambda}$.

Ahora, para aplicar el procedimiento del teorema 30, necesitamos determinar un dominio fundamental $\Gamma_0 \subset \Gamma$.

Este dominio puede tomarse como en la región azul de la figura 5.3. Los vértices son $\mathcal{V}_0 = \{v_1, v_2\}$, y empleando la notación $a_{i,j}(k) = [v_i, v_j^{(k)}]$, las aristas que pertenecen a Γ_0 son $\mathcal{E}_0 = \{a_{1,2}(0), a_{1,2}(-1), a_{1,2}(-2)\}$ (i.e., todas las aristas incidentes en v_1). Este dominio fundamental también se llama *celda de Wigner-Seitz*.

La zona de Brillouine de Γ puede ser calculada de la siguiente manera: primero notamos que el lattice dual es:

$$\mathcal{G}^* = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid (x, y) \cdot \left(n\sqrt{3} + m\frac{\sqrt{3}}{2}, m\frac{3}{2} \right) \in 2\pi\mathbb{Z}, \forall n, m \in \mathbb{Z} \right\}.$$

Entonces, $(x, y) \in \mathcal{G}^*$ si y sólo si, para cualesquiera $m, n \in \mathbb{Z}$ se tiene:

$$x\sqrt{3} \left(n + \frac{m}{2} \right) + ym\frac{3}{2} \in 2\pi\mathbb{Z}.$$

Tomando $n = -1$ y $m = 2$ tenemos que $3y \in 2\pi\mathbb{Z}$, con lo cual $y \in \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z}$, y posteriormente tomando $n = 1, m = 0$, se obtiene $x\sqrt{3} \in 2\pi\mathbb{Z}$, de modo que $x \in \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\mathbb{Z}$, con lo cual $(x, y) \in \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}}\mathbb{Z} \right) \times \left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} \right)$. Recíprocamente, si $x = \frac{2\pi}{\sqrt{3}}k, y = \frac{2\pi}{3}j$, con $k, j \in \mathbb{Z}$, entonces:

$$x\sqrt{3} \left(n + \frac{m}{2} \right) + ym\frac{3}{2} = \pi k(2n + m) + \pi jm = \pi(2kn + m(k + j))$$

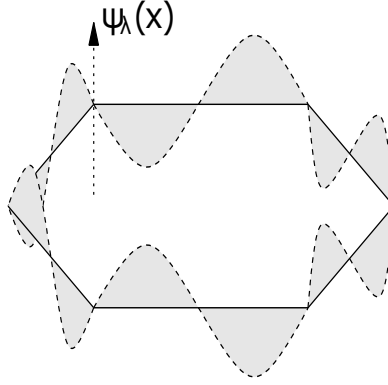


Figura 5.4: Una función propia con soporte compacto (imagen tomada de [22, pag.9])

para que esta última expresión pertenezca a $2\pi\mathbb{Z}$ para cualesquiera $m, n \in \mathbb{Z}$, entonces $k, j \in 2\mathbb{Z}$, de modo que $(x, y) \in \left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}}\mathbb{Z}\right) \times \left(\frac{4\pi}{3}\mathbb{Z}\right)$, i.e., $\mathcal{G}^* = \left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}}\mathbb{Z}\right) \times \left(\frac{4\pi}{3}\mathbb{Z}\right)$.

Ahora tomemos $x \in \mathbb{R}$, existe un único $\xi \in (-\pi, \pi]$ tal que $\frac{x\sqrt{3}}{2} - \xi \in 2\pi\mathbb{Z}$, de modo que $x - \frac{2\xi}{\sqrt{3}} \in \frac{4\pi}{\sqrt{3}}\mathbb{Z}$, de modo que $\frac{2\xi}{\sqrt{3}} \in \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right]$. De igual forma, dado $y \in \mathbb{R}$ podemos tomar $\zeta \in (-\pi, \pi]$ tal que $\frac{3}{2}y - \zeta \in 2\pi\mathbb{Z}$, con lo cual $y - \frac{2}{3}\zeta \in \frac{4\pi}{3}\mathbb{Z}$ y $\frac{2}{3}\zeta \in \left(-\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}\right]$. Entonces podemos tomar la zona de Brillouine como:

$$\mathbb{B} = \left[-\frac{2\pi}{\sqrt{3}}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right] \times \left[-\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}\right].$$

Ahora procedemos a calcular la matriz de dispersión de Γ . Como el dominio fundamental sólo contiene los vértices v_1, v_2 y cada uno tienen grado 3, entonces para cada $\theta \in \mathbb{B}$ la matriz de dispersión será:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{d_{v_1}} \sum_{v_1^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} & \frac{1}{d_{v_1}} \sum_{v_2^{(k)} \sim v_1} e^{i\theta_k} \\ \frac{1}{d_{v_2}} \sum_{v_1^{(k)} \sim v_2} e^{i\theta_k} & \frac{1}{d_{v_2}} \sum_{v_2^{(k)} \sim v_2} e^{i\theta_k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1 + e^{-i\theta_1} + e^{-i\theta_2}}{3} \\ \frac{1 + e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}}{3} & 0 \end{pmatrix}$$

donde $\theta_1 = \theta \cdot (\sqrt{3})$, $\theta_2 = \theta \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{3}{2}\right)$. Entonces la ecuación de dispersión está dada por:

$$\left| \begin{array}{cc} -\eta(\lambda) & \frac{1 + e^{-i\theta_1} + e^{-i\theta_2}}{3} \\ \frac{1 + e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}}{3} & -\eta(\lambda) \end{array} \right| = \eta(\lambda)^2 - \left| \frac{1 + e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}}{3} \right|^2 = 0$$

Desarrollando el módulo que aparece en la expresión tenemos:

$$\begin{aligned} |1 + e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}|^2 &= (1 + e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2})(1 + e^{-i\theta_1} + e^{-i\theta_2}) \\ &= 1 + e^{-i\theta_1} + e^{-i\theta_2} + e^{i\theta_1} + 1 + e^{i(\theta_1 - \theta_2)} + e^{i\theta_2} + e^{i(\theta_2 - \theta_1)} + 1 \\ &= 3 + 2(\cos(\theta_1) + \cos(\theta_2) + \cos(\theta_1 - \theta_2)) \end{aligned}$$

Utilizando las identidades $\cos(x)\cos(y) = \frac{\cos(x+y)+\cos(x-y)}{2}$ y $\cos\left(\frac{x}{2}\right) = \frac{1+\cos(x)}{2}$ se tiene:

$$\begin{aligned}
|1 + e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}|^2 &= 1 + 4 \left(\frac{\cos(\theta_1) + \cos(\theta_2)}{2} + \frac{1 + \cos(\theta_1 - \theta_2)}{2} \right) \\
&= 1 + 4 \left(\cos\left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2}\right) \right) \\
&= 1 + 8 \left(\frac{\cos\left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2}\right) + \cos\left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2}\right)}{2} \right) \cos\left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2}\right) \\
&= 1 + 8 \cos\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2}\right).
\end{aligned}$$

Finalmente, nuestra ecuación de dispersión es:

$$\eta(\lambda) = \pm \frac{1}{3} \left[1 + 8 \cos\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}}.$$

En particular, como $\eta(\lambda) = \cos\sqrt{\lambda}$ se tiene que la ecuación de dispersión para el grafeno es:

$$\cos\sqrt{\lambda} = \pm \frac{1}{3} \left[1 + 8 \cos\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}}$$

con lo cual:

$$\lambda = \left\{ \arccos\left(\pm \frac{1}{3} \left[1 + 8 \cos\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}} \right) + n\pi \right\}^2$$

Observemos que la expresión del miembro derecho (que llamaremos $f_n(\theta_1, \theta_2)$) es una función de θ_1, θ_2 . Ahora, si $\theta = (x, y)$, entonces

$$|\theta_1| = |x\sqrt{3}| \leq \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\sqrt{3} = 2\pi$$

$$|\theta_2| = \left| x\frac{\sqrt{3}}{2} + y\frac{3}{2} \right| \leq \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\sqrt{3} + \frac{2\pi}{3}\frac{3}{2} = 2\pi$$

De este modo, $|\theta_1|, |\theta_2| \leq 2\pi$. Entonces, si denotamos el dominio de las funciones f_n por:

$$W = \{(\theta \cdot e_1, \theta \cdot e_2) \mid \theta \in \mathbb{B}\}$$

podemos considerar que $W \subset [-\pi, \pi]^2$.

En conclusión, el espectro del grafeno está dado por:

$$\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \{n^2\pi^2\}_{n=1}^{\infty} \cup \bigcup_{\theta \in \mathbb{B}} \left\{ \left[\arccos\left(\pm \frac{1}{3} \left[1 + 8 \cos\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}} \right) + n\pi \right]^2 \right\}_{n \in \mathbb{Z}}$$

En la figura 5.5 se observa una superficie para $n = 0$.

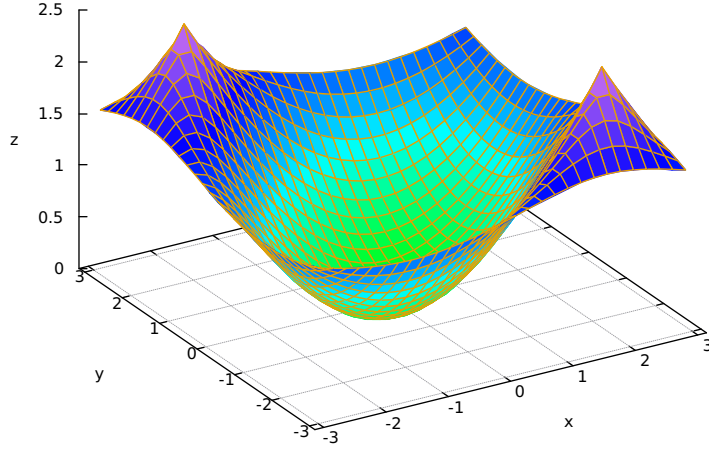


Figura 5.5: Superficie de dispersión del grafeno para $n = 0$.

5.4. Ecuación de dispersión para el caso general

Siguiendo el procedimiento de un grafo equilateral, procedemos a deducir una ecuación de dispersión para un grafo periódico general. Sea $\Gamma_0 \subset \Gamma$ un dominio fundamental, $\Gamma_0 = (\mathcal{V}_0, \mathcal{B}_0)$ con vértices $\mathcal{V}_0 = \{v_1, \dots, v_r\}$ y aristas $\mathcal{B}_0 = \{b_1, \dots, b_s\}$, con longitudes $\ell(b_1), \dots, \ell(b_s)$.

Como el hamiltoniano \mathcal{H} es periódico, el potencial q es generado por una familia de potenciales $q_j \in L^\infty[0, \ell(b_j)]$ de valor real, que supondremos son *simétricos* en sus respectivos intervalos. De este modo, la acción del hamiltoniano es independiente de la dirección que se le asigne a las aristas.

Nuevamente supondremos que cada arista $e \in \mathcal{B}_0$ es de la forma $e = a_{i,j}(k) = [v_i, v_j + e_k]$. Para cada intervalo $a_{i,j}(k)$, denotamos por $q_{i,j,k}$ a la restricción del potencial q en dicha arista (notemos que algunos de estos potenciales pueden coincidir). Para cada arista b_j , denotamos por $H_j^D : \mathcal{D}(H_j^D) \subset L^2[0, \ell(b_j)] \rightarrow L^2[0, \ell(b_j)]$ al operador de Schrödinger

$$H_j^D u(x) = -\frac{d^2}{dx^2} u(x) + q_j(x)u(x)$$

con dominio $\mathcal{D}(H_j^D) = \{u \in H^2(0, \ell(b_j)) \mid u(0) = u(\ell(b_j)) = 0\}$. Nuevamente, $\mathfrak{S}(H_j^D) = \mathfrak{S}_d(H_j^D) \subset \mathbb{R}$ es un conjunto numerable y creciente de valores propios simples.

Siguiendo la notación empleada en [6], definimos el **espectro de Dirichlet** de \mathcal{H} , como:

$$\mathfrak{S}_D(\mathcal{H}) := \bigcup_{j=1}^s \mathfrak{S}(H_j^D).$$

Consideremos ahora $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$, y denotemos por $\varphi_{i,j,k}(\lambda, x), \phi_{i,j,k}(\lambda, x)$ a las soluciones de la ecuación

$$-u''(x) + q_{i,j,k}(x)u(x) = \lambda u(x), \quad 0 < x < \ell(a_{i,j}(k)) \quad (5.16)$$

que satisfacen las condiciones

$$\varphi_{i,j,k}(\lambda, 0) = 1, \quad \phi_{i,j,k}(\lambda, \ell(a_{i,j}(k))) = 0$$

$$\phi_{i,j,k}(\lambda, 0) = 0, \quad \phi_{i,j,k}(\lambda, \ell(a_{i,j}(k))) = 1.$$

Sea $\theta \in \mathbb{B}$ y busquemos las condiciones que debe satisfacer una función $u \in H_{loc}^2(\Gamma)$ para ser una solución de \mathcal{H}^θ que satisfaga las condiciones de N-K y la condición cíclica de Bloch:

$$\forall x \in \Gamma \forall g \in \mathcal{G} \quad u(x + g) = e^{ig \cdot \theta} u(x).$$

Es suficiente considerar las condiciones en los vértices \mathcal{V}_0 . Fijemos $v_i \in \mathcal{V}_0$ y consideremos una arista $a_{i,j}(k)$, $j = \overline{1, r}$, $k = \overline{-m, m}$ adyacente a v_i . Denotando nuevamente por $u_{a_{i,j}(k)}$ a la restricción de u en dicha arista, se tiene que $u_{a_{i,j}(k)}$ debe ser solución de la ec. (5.16), de modo que puede expresarse de la forma:

$$u_{a_{i,j}(k)} = c_1 \varphi_{i,j,k} + c_2 \phi_{i,j,k}.$$

Repetiendo exactamente el mismo procedimiento que para el caso equilateral, tenemos que las constantes c_1, c_2 están dadas por:

$$u_{a_{i,j}(k)} = u(v_i) \varphi_{i,j,k} + e^{i\theta_k} u(v_j) \phi_{i,j,k},$$

con $\theta_k = e_k \cdot \theta$, $k = \overline{-m, m}$, y los valores $u(v_i), u(v_j)$ está bien definidos pues u debe satisfacer la condición de continuidad.

Aplicando ahora la condición de Kirchoff se tiene que:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} (u(v_i) \varphi'_{i,j,k}(\lambda, 0) + e^{i\theta_k} u(v_j) \phi'_{i,j,k}(\lambda, 0)) \\ &= \left(\sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} \varphi'_{i,j,k}(\lambda, 0) \right) u(v_i) + \sum_{j=1}^r \left(\sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \phi'_{i,j,k}(\lambda, 0) \right) u(v_j) \end{aligned}$$

Si definimos $\mu_{i,j,k}(\lambda) := \varphi'_{i,j,k}(\lambda, 0)$ y $\nu_{i,j,k}(\lambda) := \phi'_{i,j,k}(\lambda, 0)$, se tiene que estas funciones son holomorfas en $\mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$, y obtenemos un sistema de r - ecuaciones con r -incógnitas $u(v_1), \dots, u(v_r)$ de la forma:

$$\left(\sum_{j=1}^r \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} \mu_{i,j,k}(\lambda) \right) u(v_i) + \sum_{j=1}^r \left(\sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \nu_{i,j,k}(\lambda) \right) u(v_j) = 0, \quad i = \overline{1, r} \quad (5.17)$$

Este sistema puede reescribirse de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} &\left(\sum_{l=1}^r \sum_{v_l^{(k)} \sim v_i} \mu_{i,l,k}(\lambda) \right) u(v_i) + \sum_{j=1}^r \left(\sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \nu_{i,j,k}(\lambda) \right) u(v_j) = \\ &= \sum_{j=1}^r \left\{ \left(\sum_{l=1}^r \sum_{v_l^{(k)} \sim v_i} \mu_{i,l,k}(\lambda) \right) \delta_{i,j} + \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \nu_{i,j,k}(\lambda) \right\} u(v_j). \end{aligned}$$

De este modo, la matriz del sistema esta dado por:

$$S(\lambda, \theta) = \left[\left(\sum_{l=1}^r \sum_{v_l^{(k)} \sim v_i} \mu_{i,l,k}(\lambda) \right) \delta_{i,j} + \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \nu_{i,j,k}(\lambda) \right]_{i,j=1}^r. \quad (5.18)$$

Así, $S(\lambda, \theta)$ es una matriz holomorfa en $\mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$ y $\lambda \in \mathfrak{S}(\mathcal{H}^\theta) \setminus \mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$ si y sólo si, el sistema (5.17) tiene soluciones no triviales, i.e. si

$$\det S(\lambda, \theta) = 0$$

Notemos que también podemos escribir $S(\lambda, \theta) = D(\lambda, \theta) + E(\lambda, \theta)$, donde

$$D(\lambda, \theta) := \text{diag} \left(\sum_{l=1}^r \sum_{v_l^{(k)} \sim v_i} \mu_{i,l,k}(\lambda) \right)_{i=1}^r$$

y

$$E(\lambda, \theta) := \left(\sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \nu_{i,j,k}(\lambda) \right)_{i,j=1}^r.$$

Recíprocamente, si $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$ es solución de $\det S(\lambda, \theta) = 0$, tomamos una solución no trivial $u(v_1), \dots, u(v_r)$ y definimos

$$u_{a_{i,j}(k)} = u(v_i) \varphi_{i,j,k} + e^{i\theta_k} u(v_j) \phi_{i,j,k}$$

y definimos u por medio las funciones anteriores y sus trasladados. Entonces $u \in H_{loc}^2(\Gamma)$ será una solución de $\mathcal{H}^\theta u = \lambda u$ que satisfaga las condiciones de N-K y la condición cíclica de Bloch. Luego $u|_{\Gamma_0} \in \mathcal{D}(\mathcal{H}^\theta)$ y $\lambda \in \mathfrak{S}(\mathcal{H}^\theta)$. En resumen se tiene el siguiente teorema.

Teorema 32. Sean $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$. Entonces $\lambda \in \mathfrak{S} \mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$ si y sólo si es solución de la ecuación $\det S(\lambda, \theta) = 0$. En consecuencia

$$\mathfrak{S}(\mathcal{H}^\theta) \setminus \mathfrak{S}_D(\mathcal{H}) = \bigcup_{\theta \in \mathbb{B}} \{\lambda \mid \det S(\lambda, \theta) = 0\}.$$

Observemos que cuando el grafo es equilateral y equipotencial, la ec. $\det S(\lambda, \theta) = 0$ se reduce a $\eta(\lambda) = f(\theta)$, que ya se había obtenido previamente.

Ejemplo 10. Consideremos nuevamente el grafo $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$ del grafeno como se puede ver en la figura 5.4. Nuevamente, el grupo \mathcal{G} que actúa sobre Γ es generado por los vectores unitarios $e_1 = (\sqrt{3}, 0)$ y $e_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2}\right)$ y tomamos el dominio fundamental Γ_0 formado por los vértices $\mathcal{V}_0 = \{v_1, v_2\}$ y las aristas $\mathcal{E}_0 = \{a_{1,2}(0), a_{1,2}(-1), a_{1,2}(-2)\}$. El hamiltoniano es $\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$, con dominio las funciones $u \in H^2(\Gamma)$ que satisfacen las condiciones de N-K. En este ejemplo, supondremos que el potencias q es periódico, pero *no es* equipotencial. Sin embargo, se supondra que este potencial es generado por 3 potenciales constantes, $c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{R}$ que corresponden a las aristas $a_{1,2}(0), a_{1,2}(-1)$

y $a_{1,2}(-2)$ } respectivamente , de modo que \mathcal{H} es autoadjunto y su espectro admite la descomposición de Bloch $\mathfrak{S}(\mathcal{H}) = \bigcup_{\theta \in \mathbb{B}} \mathfrak{S}(\mathcal{H}^\theta)$.

Ahora denotemos el problema de Dirichlet asociado a c_i por:

$$H_i^D = \begin{cases} -u'' + c_i u = \lambda u_i & x \in (0, \ell_i) \\ u(0) = u(\ell_i) = 0 \end{cases}$$

donde ℓ_i denota la longitud de la arista correspondiente a c_i , para $i = 1, 2, 3$. Notemos que la ecuación anteriores puede escribirse como $-u'' = (\lambda - c_i)u$, de modo que que el espectro está dado por $\mathfrak{S}(H_i^D) = \left\{ \left(\frac{n\pi}{\ell} \right)^2 + c_i \right\}_{n=1}^{\infty}$, $i = 1, 2, 3$.

Supongamos que $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \left(\bigcup_{i=1}^3 \left\{ \left(\frac{n\pi}{\ell} \right)^2 + c_i \right\}_{n=1}^{\infty} \right)$, y sean φ_i, ϕ_i las soluciones de $-u'' = (\lambda - c_i)u$ en $(0, \ell_i)$ que satisfacen $\varphi_i(\lambda, 0) = \phi_i(\lambda, \ell_i) = 1$ y $\varphi_i(\lambda, \ell_i) = \phi_i(\lambda, 0) = 0$. Estas soluciones están dadas por:

$$\varphi_i(\lambda, x) = \frac{\sin(\sqrt{\lambda - c_i}(\ell_i - x))}{\sin(\sqrt{\lambda - c_i}\ell_i)} \quad \text{y} \quad \phi_i(\lambda, x) = \frac{\sin(\sqrt{\lambda - c_i}x)}{\sin(\sqrt{\lambda - c_i}\ell_i)}$$

Calculando las derivadas de estas funciones obtenemos:

$$\varphi_i'(\lambda, 0) = -\frac{\sqrt{\lambda - c_i} \cos(\sqrt{\lambda - c_i}\ell_i)}{\sin(\sqrt{\lambda - c_i}\ell_i)} = -\sqrt{\lambda - c_i} \cot(\sqrt{\lambda - c_i}\ell_i)$$

$$\phi_i'(\lambda, 0) = \frac{\sqrt{\lambda - c_i} \cos(\sqrt{\lambda - c_i} \cdot 0)}{\sin(\sqrt{\lambda - c_i}\ell_i)} = \frac{\sqrt{\lambda - c_i}}{\sin(\sqrt{\lambda - c_i}\ell_i)} = \sqrt{\lambda - c_i} \csc(\sqrt{\lambda - c_i}\ell_i)$$

De modo que las funciones de dispersión μ_i, ν_i están dadas por

$$\mu_i(\lambda) = -\sqrt{\lambda - c_i} \cot(\sqrt{\lambda - c_i}\ell_i) \quad \text{y} \quad \nu_i(\lambda) = \sqrt{\lambda - c_i} \csc(\sqrt{\lambda - c_i}\ell_i)$$

Tomemos $\theta \in \mathbb{B}$. Por el teorema 32 $\lambda \in \mathfrak{S}(\mathcal{H}^\theta)$ si y sólo si satisface la siguiente ecuación

$$\det \left[\left(\sum_{l=1}^2 \sum_{v_l^{(k)} \sim v_i} \mu_{i,l,k}(\lambda) \right) \delta_{i,j} + \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \nu_{i,j,k}(\lambda) \right]_{i,j=1,2} = 0$$

Aquí se emplea el convenio $\theta_0 := 0$. Puesto que $\mathcal{B}_{v_1} = \{a_{1,2}(0), a_{1,2}(-1), a_{1,2}(-2)\}$ y $\mathcal{B}_{v_2} = \{a_{2,1}(0), a_{2,1}(1), a_{1,2}(2)\}$ este determinante se transforma en:

$$\begin{vmatrix} \mu_{1,2,0} + \mu_{1,2,-1} + \mu_{1,2,-2} & \nu_{1,2,0} + \nu_{1,2,-1}e^{-i\theta_1} + \nu_{1,2,-2}e^{-i\theta_2} \\ \nu_{2,1,0} + \nu_{2,1,1}e^{i\theta_1} + \nu_{2,1,2}e^{i\theta_2} & \mu_{2,1,0} + \mu_{2,1,1} + \mu_{2,1,2} \end{vmatrix} = 0$$

Notemos que los potenciales correspondientes a $a_{1,2}(0), a_{1,2}(-1), a_{1,2}(-2)$ son c_1, c_2, c_3 respectivamente. De acuerdo con la figura 5.3, las aristas $a_{2,1}(0), a_{2,1}(1), a_{1,2}(2)$ son trasladados de $a_{2,1}(0), a_{2,1}(1), a_{1,2}(2)$ respectivamente, por lo cual los respectivos potenciales son c_1, c_2, c_3 , entonces nuestro determinante puede escribirse como:

$$\begin{vmatrix} \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 & \nu_1 + \nu_2 e^{-i\theta_1} + \nu_3 e^{-i\theta_2} \\ \nu_1 + \nu_2 e^{i\theta_1} + \nu_3 e^{i\theta_2} & \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 \end{vmatrix} = 0.$$

Puesto que cada hamiltoniano de Bloch \mathcal{H}^θ es auto-adjunto, su espectro es real, por lo cual sólo estamos interesados en las soluciones reales de la ecuación anterior. Así, podemos tomar a las funciones μ_i, ν_i como funciones de $\lambda \in \mathbb{R}$, de modo que resultan ser funciones de valor real, entonces:

$$\begin{vmatrix} \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 & \nu_1 + \nu_2 e^{-i\theta_1} + \nu_3 e^{-i\theta_2} \\ \nu_1 + \nu_2 e^{i\theta_1} + \nu_3 e^{i\theta_2} & \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 \end{vmatrix} = \left(\sum_{j=1}^3 \mu_j(\lambda) \right)^2 - \left| \sum_{j=1}^3 \nu_j(\lambda) e^{-i\theta_{j-1}} \right|^2 = 0.$$

De este modo, $\mathfrak{S}(\mathcal{H}^\theta) \setminus \left(\bigcup_{i=1}^3 \left\{ \left(\frac{n\pi}{\ell} \right)^2 + c_i \right\}_{n=1}^{\infty} \right)$ está formado de las raíces reales de la ecuación:

$$\left(\sum_{j=1}^3 \sqrt{\lambda - c_j} \cot(\sqrt{\lambda - c_j} \ell_j) \right)^2 - \left| \sum_{j=1}^3 e^{i\theta_{j-1}} \sqrt{\lambda - c_j} \csc(\sqrt{\lambda - c_j} \ell_j) \right|^2 = 0$$

5.5. Representaciones analíticas para la ecuación de dispersión

Ahora que se ha obtenido una ecuación de dispersión para un grafo periódico, se procede a desarrollar expresiones analíticas para las funciones $\eta(\lambda)$, $\mu_{i,j,k}(\lambda)$ y $\nu_{i,j,k}(\lambda)$. Empezamos considerando el caso para un grafo $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$ **equilateral y equipotencial** de longitud ℓ . Para simplificar notación, denotamos $L = -\frac{d^2}{dx^2} + q_0(x)$.

Sea $\lambda = \omega^2 \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}(H^D)$ y consideremos las soluciones $\varphi_0(\omega, x), \varphi_1(\omega, x)$ de la ecuación $Lu = \omega^2 u$ en $(0, \ell)$ que satisfacen las condiciones $\varphi_0(\omega, 0) = \varphi_1(\omega, \ell) = 1$ y $\varphi_0(\omega, \ell) = \varphi_1(\omega, 0) = 0$, y recordemos que la función de dispersión para el grafo Γ está dada por:

$$\eta(\omega) = \frac{\varphi_1'(\omega, \ell)}{\varphi_1'(\omega, 0)}.$$

Buscaremos una expresión analítica para $\eta(\omega)$ de la siguiente manera. Tomemos una solución $f \in C^2(0, \ell) \cap C^1[0, \ell]$ de la ecuación $Lf = 0$ en $(0, \ell)$, que no se anula en el intervalo $[0, \ell]$. Como el potencial q_0 es de valor real, podemos tomar dos soluciones reales f_1, f_2 que formen un conjunto fundamental de soluciones para la ecuación $Lu = 0$, estas funciones deben tener ceros alternados (véase [1, cap. 1]) por lo cual la función $\tilde{f} = f_1 + if_2$ no tiene ceros en $[0, \ell]$. Finalmente se puede tomar $f = \frac{\tilde{f}}{\tilde{f}(0)}$. Una forma de construir las soluciones f_1, f_2 puede ser empleando el método SPPS estudiado en el capítulo 1, esta construcción puede verse, por ejemplo, en [16]. Finalmente consideramos los sistemas de integrales recursivas $\{\tilde{X}^{(k)}(x)\}_{k=0}^{\infty}, \{X^{(k)}(x)\}_{k=0}^{\infty}$ del método SPPS (teorema 7) y $\{\hat{\varphi}_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$ las potencias formales asociadas a f centradas en 0.

Una primera forma de construir una expresión para la función de dispersión η , es expresar a la función $\varphi_1(\omega, x)$ mediante el método SPPS, y encontrar una expresión en serie de potencias para $\eta(\omega)$. Este procedimiento es realizado en el artículo [3], donde se muestra como usar la representación SPPS para el cálculo aproximado del espectro $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$.

Nosotros procederemos de manera diferente. Denotemos $h = f'(0)$ y consideremos las soluciones $\mathbf{c}_h(\omega, x)$, $\mathbf{s}(\omega, x)$ de $Lu = \omega^2 u$ que satisfacen las condiciones:

$$\mathbf{c}_h(\omega, 0) = 1, \mathbf{c}'_h(\omega, 0) = h \quad \text{y} \quad \mathbf{s}(\omega, 0) = 0, \mathbf{s}'(\omega, 0) = 1.$$

Notemos que $\mathbf{c}_h(\omega, x)$, $\mathbf{s}(\omega, x)$ forman un conjunto fundamental de soluciones para $Lu = \omega^2 u$, con lo cual podemos escribir:

$$\varphi_0 = a\mathbf{c}_h + b\mathbf{s}, \quad \varphi_1 = \alpha\mathbf{c}_h + \beta\mathbf{s}.$$

Evaluando φ_1 en $x = 0$ tenemos

$$0 = \varphi_1(\omega, 0) = \alpha\mathbf{c}_h(\omega, 0) + \beta\mathbf{s}(\omega, 0) = \alpha \Rightarrow \varphi_1(\omega, x) = \beta\mathbf{s}(\omega, x).$$

Evaluamos ahora en $x = \ell$:

$$1 = \varphi_1(\omega, \ell) = \beta\mathbf{s}(\omega, \ell).$$

Puesto que $\omega^2 \notin \mathfrak{S}(H^D)$ y $\mathbf{s}(\omega, 0) = 0$, entonces $\mathbf{s}(\omega, \ell) \neq 0$, con lo cual $\beta = \frac{1}{\mathbf{s}(\omega, \ell)}$.

Ahora repetimos el mismo procedimiento para φ_0 :

$$1 = \varphi_0(\omega, 0) = a\mathbf{c}_h(\omega, 0) + b\mathbf{s}(\omega, 0) = a \Rightarrow \varphi_0(\omega, x) = \mathbf{c}_h(\omega, x) + \beta\mathbf{s}(\omega, x).$$

y

$$0 = \varphi_0(\omega, \ell) = \mathbf{c}_h(\omega, \ell) + b\mathbf{s}(\omega, \ell) \Rightarrow b = -\frac{\mathbf{c}_h(\omega, \ell)}{\mathbf{s}(\omega, \ell)}.$$

En conclusión tenemos que:

$$\varphi_0(\omega, x) = \mathbf{c}_h(\omega, x) - \frac{\mathbf{c}_h(\omega, \ell)}{\mathbf{s}(\omega, \ell)}\mathbf{s}(\omega, x) \quad \text{y} \quad \varphi_1(\omega, x) = \frac{\mathbf{s}(\omega, x)}{\mathbf{s}(\omega, \ell)}. \quad (5.19)$$

Ahora calculamos la expresión para $\eta(\omega)$:

$$\eta(\omega) = \frac{\varphi'_1(\omega, \ell)}{\varphi'_1(\omega, 0)} = \frac{\mathbf{s}'(\omega, \ell)}{\mathbf{s}'(\omega, 0)} = \mathbf{s}'(\omega, \ell).$$

Sea $K_f(x, t)$ el núcleo de transformación asociado a $h = f'(0)$. Por el teorema 9 se tiene:

$$\mathbf{s}(\omega, x) = \frac{\sin(\omega x)}{\omega} + \int_{-x}^x K_f(x, t) \frac{\sin(\omega t)}{\omega} dt.$$

Derivando esta expresión con respecto a x y empleando la regla de Leibniz para derivar bajo el signo de la integral obtenemos:

$$\begin{aligned} \mathbf{s}'(\omega, x) &= \cos(\omega x) + K_f(x, x) \frac{\sin(\omega x)}{\omega} + K_f(x, -x) \frac{\sin(-\omega x)}{\omega} + \int_{-x}^x \frac{\partial}{\partial x} K_f(x, t) \frac{\sin(\omega t)}{\omega} dt \\ &= \cos(\omega x) + (K_f(x, x) - K_f(x, -x)) \frac{\sin(\omega x)}{\omega} + \int_{-x}^x \frac{\partial}{\partial x} K_f(x, t) \frac{\sin(\omega t)}{\omega} dt. \end{aligned}$$

Como el núcleo K_f satisface las condiciones de Goursat

$$K_f(x, x) = \frac{h}{2} + \frac{1}{2} \int_0^x q_0(s) ds \quad \text{y} \quad K_f(x, -x) = \frac{h}{2},$$

tenemos finalmente que:

$$\mathbf{s}'(\omega, x) = \cos(\omega x) + \left(\frac{1}{2} \int_0^x q_0(s) ds \right) \frac{\sin(\omega x)}{\omega} + \int_{-x}^x \frac{\partial}{\partial x} K_f(x, t) \frac{\sin(\omega t)}{\omega} dt.$$

Como q_0 es simétrico en $[0, \ell]$, entonces $\int_0^\ell q(s) ds = 2 \int_0^{\frac{\ell}{2}} q(s) ds$, con lo cual obtenemos la siguiente representación para la función de dispersión.

Proposición 21. *Para un grafo equilateral $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$ y equipotencial con potencial simétrico q_0 , la función de dispersión $\eta(\omega)$ está dada para todo $\omega^2 \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}(H^D)$ por:*

$$\eta(\omega) = \cos(\omega \ell) + \left(\int_0^{\frac{\ell}{2}} q(s) ds \right) \frac{\sin(\omega \ell)}{\omega} + \int_{-\ell}^\ell \frac{\partial}{\partial x} K_f(\ell, t) \frac{\sin(\omega t)}{\omega} dt \quad (5.20)$$

Denotemos por $K_1(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} K_f(x, t)$. De forma análoga al teorema 10, se puede demostrar (véase [15]) que:

$$K_1(x, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\gamma_n(x)}{x} P_m \left(\frac{t}{x} \right),$$

con:

$$\gamma_n(x) = \frac{2n+1}{x} \left(\sum_{k=0}^m \frac{l_{k,m} \hat{\varphi}'_k(x)}{x^k} - \frac{m(m+1)}{2x} - \frac{1}{2} \int_0^x q_0(s) ds - \frac{h}{2} (1 + (-1)^m) \right). \quad (5.21)$$

De hecho podemos definir las funciones:

$$\psi_k(x) := \begin{cases} \frac{X^{(k)}(x)}{f(x)}, & \text{si } k \text{ es par,} \\ \frac{\tilde{X}^{(k)}(x)}{f(x)}, & \text{si } k \text{ es impar} \end{cases} \quad \forall k \in \mathbb{N}_0$$

y obtener que

$$\hat{\varphi}'_k = k \psi_{k-1} + \frac{f'}{f} \hat{\varphi}_k, \quad \forall k \in \mathbb{N}_0$$

(véase [13]). Sustituyendo la serie de Fourier-Legendre de $K_1(x, t)$ en la fórmula de $\mathbf{s}'(\omega, x)$ se obtiene la siguiente expresión:

$$\mathbf{s}'(\omega, x) = \cos(\omega x) + \frac{1}{2} \left(\int_0^x q_0(s) ds \right) \frac{\sin(\omega x)}{\omega} + \frac{2}{\omega} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \gamma_{2m+1}(x) j_{2m+1}(\omega x)$$

y esta serie converge uniformemente con respecto a x en todo $[0, \ell]$ y con respecto a ω en cualquier compacto de $\mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}(H^D)$ (la demostración de estos hechos puede encontrarse en [15]). En consecuencia se obtiene la siguiente representación:

Teorema 33. *Para un grafo equilateral $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$ y equipotencial con potencial simétrico q_0 , la función de dispersión $\eta(\omega)$ está dada para todo $\omega^2 \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}(H^D)$ por:*

$$\eta(\omega) = \cos(\omega \ell) + \left(\int_0^{\frac{\ell}{2}} q_0(s) ds \right) \frac{\sin(\omega \ell)}{\omega} + \frac{2}{\omega} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \gamma_{2m+1}(\ell) j_{2m+1}(\omega \ell) \quad (5.22)$$

donde las funciones $\{\gamma_m(x)\}_{m=0}^{\infty}$ están definidas por (5.21).

Por supuesto, la importancia de la representación (5.22) es que puede ser utilizada para obtener un método de aproximación del espectro del grafo Γ . Supongamos primero que Γ es un grafo que contiene un ciclo. Entonces, por el teorema 31, $\mathfrak{S}(H^D) \subset \mathfrak{S}(\mathcal{H})$ y corresponde a valores propios de multiplicidad infinita. Para calcular $\mathfrak{S}(H^D)$, consideramos una solución $u(\omega, x)$ de $Lu = \omega^2 u$ en $(0, \ell)$. Entonces:

$$u(\omega, x) = \alpha \mathbf{c}_h(\omega, x) + \beta \mathbf{s}(\omega, x).$$

El valor $\omega^2 \in \mathfrak{S}(H^D)$ si y sólo si, $u(\omega, 0) = u(\omega, \ell) = 0$, de modo que:

$$0 = \alpha \mathbf{c}_h(\omega, 0) + \beta \mathbf{s}(\omega, 0) = \alpha$$

con lo cual $u(\omega, x) = \beta \mathbf{s}(\omega, x)$. Entonces $\beta \neq 0$ y obtenemos

$$0 = \beta \mathbf{s}(\omega, \ell) \Leftrightarrow \mathbf{s}(\omega, \ell) = 0.$$

Entonces, $\mathfrak{S}(H^D)$ consiste precisamente de las ceros reales de la función $\mathbf{s}(\omega, \ell)$, que de acuerdo con el teorema 11 puede escribirse como:

$$\mathbf{s}(\omega, \ell) = \frac{\sin(\omega\ell)}{\omega} + \frac{2}{\omega} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta_{2n+1}(\ell) j_{2n+1}(\omega\ell) = 0.$$

Por otro lado, si $\theta \in \mathbb{B}$ y $f(\theta)$ es un valor propio de la matriz $\sigma(\theta) = \left(\frac{1}{d_{v_i}} \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \right)_{i,j=1}^r$, por el teorema 30, $\omega^2 \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{S}(H^D)$ será un valor propio del hamiltoniano de Bloch \mathcal{H}^θ si y sólo si:

$$\cos(\omega\ell) + \left(\int_0^{\frac{\ell}{2}} q_0(s) ds \right) \frac{\sin(\omega\ell)}{\omega} + \frac{2}{\omega} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \gamma_{2m+1}(\ell) j_{2m+1}(\omega\ell) = f(\theta).$$

En resumen tenemos el siguiente teorema:

Teorema 34. *Sea Γ un grafo periódico equilateral de longitud $\ell > 0$ y equipotencial con potencial $q_0 \in C[0, \ell]$ simétrico y de valor real, el cual posee al menos un ciclo. Entonces el espectro del operador de Schrödinger \mathcal{H} , $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ consiste de los $\omega^2 \in \mathbb{R}$ para los cuales se cumple la ecuación:*

$$\frac{\sin(\omega\ell)}{\omega} + \frac{2}{\omega} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta_{2n+1}(\ell) j_{2n+1}(\omega\ell) = 0 \quad (5.23)$$

y de los $\omega^2 \in \mathbb{R}$ que no satisfacen la ecuación anterior, pero si satisfacen para algún $\theta \in \mathbb{B}$ la siguiente ecuación:

$$\cos(\omega\ell) + \left(\int_0^{\frac{\ell}{2}} q_0(s) ds \right) \frac{\sin(\omega\ell)}{\omega} + \frac{2}{\omega} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \gamma_{2m+1}(\ell) j_{2m+1}(\omega\ell) = f(\theta) \quad (5.24)$$

donde $f(\theta)$ es un valor propio de la matriz de dispersión $\sigma(\theta) = \left(\frac{1}{d_{v_i}} \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \right)_{i,j=1}^r$.

Observemos que el teorema 34 provee de un método numérico para el cálculo del espectro $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$. Como puede verse en [15], se pueden considerar las aproximaciones para $M \in \mathbb{N}$:

$$\mathbf{s}_M(\omega) = \frac{\sin(\omega\ell)}{\omega} + \frac{2}{\omega} \sum_{n=0}^{\lfloor \frac{M-1}{2} \rfloor} (-1)^n \beta_{2n+1}(\ell) j_{2n+1}(\omega\ell) \quad (5.25)$$

y

$$\eta_M(\omega) = \cos(\omega\ell) + \left(\int_0^{\frac{\ell}{2}} q_0(s) ds \right) \frac{\sin(\omega\ell)}{\omega} + \frac{2}{\omega} \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{M-1}{2} \rfloor} (-1)^m \gamma_{2m+1}(\ell) j_{2m+1}(\omega\ell). \quad (5.26)$$

(aquí $\lfloor \frac{M-1}{2} \rfloor$ denota la parte entera de $\frac{M-1}{2}$). Se puede demostrar que la aproximación de \mathbf{s}_M y η_M es uniforme. Concretamente, para cualquier ω perteneciente a una banda $|\operatorname{Im}(\omega)| \leq C$, con $C > 0$, se cumple:

$$|\eta(\omega) - \eta_M(\omega)| \leq \frac{2\epsilon \sinh(C\ell)}{C} \quad \text{y} \quad |\mathbf{s}(\omega, \ell) - \mathbf{s}_M(\omega)| \leq \frac{2\epsilon \sinh(C\ell)}{C}.$$

De este modo, las soluciones de las ecuaciones aproximadas

$$\mathbf{s}_M(\omega) = 0 \quad \text{y} \quad \eta_M(\omega) = f(\theta)$$

pueden tomarse como aproximaciones del espectro $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$. De hecho, existen diversos métodos numéricos que permiten el cálculo aproximado de tales raíces, por ejemplo en [17] se muestra un algoritmo basado en el principio del argumento y el teorema de Rouché para localizar y calcular las aproximaciones de las raíces de este tipo de ecuaciones.

Ahora, para el **caso general**, sea Γ es un grafo periódico y consideramos un dominio fundamental $\Gamma_0 \subset \Gamma$ con vértices $\mathcal{V}_0 = \{v_1, \dots, v_r\}$ y aristas $\mathcal{E}_0 = \{e_1, \dots, e_s\}$, cuyo hamiltoniano es el operador de Schrödinger periódico \mathcal{H} con un potencial generado por las funciones $q_i \in C[0, \ell(b_i)]$, $i = \overline{1, s}$, cada una simétrica y de valor real. Para cada intervalo $[0, \ell(b_i)]$, construimos la correspondiente solución $f_i \in C^1[0, \ell(b_i)] \cap C^2(0, \ell(b_i))$ de $f_i'' - q_i f_i = 0$ que no se anula en todo el intervalo, y con base en esta función, se construyen las potencias formales y las funciones $\mathbf{c}_i, \mathbf{s}_i$, con $\mathbf{c}_i'(0) = h_i = f_i'(0)$.

Por el teorema 32 sabemos que $\omega^2 \in \mathbb{R} \setminus \mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$, si sólo si satisface la ecuación:

$$\det \left[\left(\sum_{l=1}^r \sum_{v_l^{(k)} \sim v_i} \mu_{i,l,k}(\omega) \right) \delta_{i,j} + \sum_{v_j^{(k)} \sim v_i} e^{i\theta_k} \nu_{i,j,k}(\omega) \right]_{i,j=1}^r = 0.$$

En este caso, $\mu_{i,j,k}(\omega) = \varphi'_{i,j,k}(0)$, $\nu_{i,j,k}(\omega) = \phi'_{i,j,k}(0)$, $\varphi_{i,j,k}, \phi_{i,j,k}$ son las soluciones de $-u'' + q_{i,j,k}u = \omega^2 u$ en $(0, \ell(a_{i,j}(k)))$ que satisfacen las condiciones $\varphi_{i,j,k}(\omega, 0) = \phi_{i,j,k}(\omega, \ell(a_{i,j}(k))) = 1$ y $\varphi_{i,j,k}(\omega, \ell(a_{i,j}(k))) = \phi_{i,j,k}(\omega, 0) = 0$. Una vez más, de forma análoga al caso equilateral, estas funciones pueden escribirse como:

$$\varphi_{i,j,k}(\omega, x) = \mathbf{c}_{i,j,k}(\omega, x) - \frac{\mathbf{c}_{i,j,k}(\omega, \ell(a_{i,j}(k)))}{\mathbf{s}_{i,j,k}(\omega, \ell(a_{i,j}(k)))} \mathbf{s}_{i,j,k}(\omega, x)$$

$$\phi_{i,j,k}(\omega, x) = \frac{\mathbf{s}_{i,j,k}(\omega, x)}{\mathbf{s}_{i,j,k}(\omega, \ell(a_{i,j}(k)))}$$

de modo que:

$$\begin{aligned}\mu_{i,j,k}(\omega) &= \mathbf{c}'_{i,j,k}(\omega, 0) - \frac{\mathbf{c}_{i,j,k}(\omega, \ell(a_{i,j}(k)))}{\mathbf{s}_{i,j,k}(\omega, \ell(a_{i,j}(k)))} \mathbf{s}'_{i,j,k}(\omega, 0) \\ \nu_{i,j,k}(\omega) &= \frac{\mathbf{s}'_{i,j,k}(\omega, 0)}{\mathbf{s}_{i,j,k}(\omega, \ell(a_{i,j}(k)))}\end{aligned}$$

Por las propiedades de las soluciones $\mathbf{c}_{h,i,j,k}$, $\mathbf{s}_{i,j,k}$ sabemos que las derivadas en $x = 0$ toman los valores $\mathbf{c}'_{i,j,k}(0) = h_{i,j,k} = f'_{i,j,k}(0)$, $\mathbf{s}'_{i,j,k}(0) = 1$, de manera que:

$$\mu_{i,j,k}(\omega) = h_{i,j,k} - \frac{\mathbf{c}_{h,i,j,k}(\omega, \ell(a_{i,j}(k)))}{\mathbf{s}_{i,j,k}(\omega, \ell(a_{i,j}(k)))} \quad (5.27)$$

$$\nu_{i,j,k}(\omega) = \frac{1}{\mathbf{s}_{i,j,k}(\omega, \ell(a_{i,j}(k)))} \quad (5.28)$$

Por supuesto, las funciones (5.27) y (5.28) pueden expresarse por medio de series de Neumann, y las series parciales de tales series pueden emplearse para el cálculo aproximado de los valores propios de cada hamiltoniano de Bloch \mathcal{H}^θ .

Comentarios y observaciones

En esta sección se mostró que si un grafo periódico con potencial simétrico contiene ciclos, entonces $\mathfrak{S}(H^D) \subset \mathfrak{S}_p(\mathcal{H})$. Sin embargo, aún no se sabe bajo que condiciones se dará la igualdad. También es importante recalcar que dicho resultado se tiene, hasta ahora, sólo para grafos equilaterales. No obstante, existen algunas propiedades que deben cumplir los valores propios de \mathcal{H} , y que son válidas para cualquier grafo periódico en general, como se puede ver en siguiente teorema:

Teorema 35. [21] *Sea Γ un grafo \mathbb{Z}^m -periódico, cuyo hamiltoniano \mathcal{H} está dado por el operador de Schrödinger con potencial simétrico y periódico, y cuyo dominio consiste de las funciones en $H^2(\Gamma)$ que satisfacen las condiciones de N-K. Suponga que $\lambda \in \mathfrak{S}_p(\mathcal{H}) \setminus \mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$. Entonces λ posee una función propia con soporte compacto. Más aún:*

$$E_\lambda(\mathcal{H}) = \overline{\{\psi \in E_\lambda(\mathcal{H}) \mid \text{supp}(\psi) \text{ es compacto}\}}.$$

Como consecuencia del teorema anterior y del teorema 31, un grafo periódico equilateral y equipotencial que contiene ciclos, sólo puede tener valores propios de multiplicidad infinita.

Existe también otro resultado que establece una condición suficiente para que un valor $\lambda \in \mathbb{R}$ sea un valor espectral.

Teorema 36. (Schnol, [21]) *Sea Γ un grafo \mathbb{Z}^m -periódico, uyo hamiltoniano \mathcal{H} está dado por el operador de Schrödinger con potencial simétrico y periódico, y cuyo dominio consiste de las funciones en $H^2(\Gamma)$ que satisfacen las condiciones de N-K. Sea $\lambda \in \mathbb{R}$, para el cual existe una función $\Phi \in H^2_{loc}(\Gamma)$ tal que:*

1. $\forall b \in \mathcal{B} \quad -\frac{d^2}{dx^2}\Phi_b(x) + q_b(x)\Phi_b(x) = \lambda\Phi_b(x), \quad c.t.p. [0, \ell(b)].$

2. Φ *satisface las condiciones de N-K en cada vértice.*

3. *Dado $x_0 \in \Gamma$ fijo,*

$$\forall \epsilon > 0 \exists C_\epsilon > 0 : \forall r > 0 \quad \int_{B_\Gamma(x_0, r)} |\Phi(x)|^2 dx \leq C_\epsilon e^{r^\epsilon}.$$

Entonces $\lambda \in \mathfrak{S}(\mathcal{H})$.

Una función $\Phi \in H_{loc}^2(\Gamma)$ que satisfaga las condiciones 1 y 2 del teorema de Schnol, se denomina una **función propia generalizada**. Por supuesto, esto no implica que λ sea un valor propio.

6

Conclusiones y comentarios finales

En este trabajo de tesis se ha realizado un estudio acerca de la teoría de grafos cuánticos. Entre los principales resultados presentados se encuentran:

1. Mostrar una construcción del espacio métrico Γ_{met} con la métrica d_Γ , así como estudiar sus principales propiedades. Además, se establece una caracterización de las funciones $f : \Gamma_{met} \rightarrow \mathbb{C}$, por medio de familias de funciones $\{f_b\}_{b \in \mathcal{B}}$ definidas en los intervalos $[0, \ell(b)]$.
2. Se realizó una investigación de la teoría de operadores diferenciales definidos en grafos cuánticos. Se estudiaron las principales propiedades del hamiltoniano asociado a un grafo cuántico, principalmente la propiedad de ser autoadjunto, y se demostró el teorema de Sturm-Liouville para grafos compactos, el cual establece que el espectro del hamiltoniano es puramente discreto.
3. Presentamos las definiciones básicas de un grafo periódico y un grafo encajado en \mathbb{R}^n . Se mostró que todo grafo periódico puede ser generado a partir de los traslados de un dominio fundamental Γ_0 . Además, estudiamos la descomposición espectral y la representación *band-gap* del espectro del hamiltoniano \mathcal{H} .
4. Uno de los resultados principales obtenidos en este trabajo, fue el demostrar que para un grafo Γ equilátero que admite ciclos, con un hamiltoniano \mathcal{H} periódico y equipotencial, con potencial simétrico, se cumple que $\mathfrak{S}_D(\mathcal{H}) \subset \mathfrak{S}_p(\mathcal{H})$, y cada $\lambda \in \mathfrak{S}_D(\mathcal{H})$ corresponde a un valor propio de \mathcal{H} de multiplicidad infinita.
5. Se desarrollaron dos ecuaciones de dispersión para el cálculo del espectro de un grafo periódico: uno para el caso general y otra para cuando el grafo es equilátero y equipotencial. Además se obtuvieron representaciones analíticas para la ecuación de dispersión de un grafo equilátero empleando el método de series de Neumann de funciones de Bessel esféricas. Estas representaciones pueden ser utilizadas para el cálculo numérico del espectro.

Por supuesto, los resultados presentados en este trabajo abarcan sólo algunos problemas de la teoría de los grafos cuánticos, y aún existen problemas muy interesantes por estudiar.

Por ejemplo, en el capítulo 2 se demostró el teorema de Sturm-Liouville para grafos compactos, sin embargo, es interesante desarrollar alguna ecuación de dispersión con la cual se pueda caracterizar los valores propios del hamiltoniano \mathcal{H} . Además, una vez obtenida tal ecuación de dispersión, el representar ésta de forma analítica, ya sea por medio del método SPPS o las series de Neumann, proveería de un método numérico para el cálculo efectivo de los valores propios. Es importante comentar que los resultados presentados son válidos para operadores autoadjuntos, pero también es importante analizar el caso cuando el hamiltoniano no es autoadjunto, principalmente cuando el operador de Schrödinger tiene un potencial de valor complejo, o incluso singular.

Por su parte, desarrollar la teoría de operadores de transmutación para operadores definidos sobre grafos cuánticos sería un resultado muy importante, ya que permitiría analizar las propiedades de un hamiltoniano “complicado”, como lo es el operador de Schrödinger, empleando las propiedades de un operador “sencillo”, como el operador menos segunda derivada, tal y como ya se ha hecho para operadores diferenciales en intervalos de la recta.

Como mencionamos anteriormente, en este trabajo hemos demostrado que el espectro de Dirichlet de un grafo periódico equilateral y equipotencial que contiene ciclos, está contenido en el espectro puntual. Sin embargo, aún no se sabe si el espectro puntual es idéntico al de Dirichlet, ni se tiene una caracterización completa del espectro puntual para el caso general. También es importante recalcar que no se tiene aún un resultado para un grafo periódico general.

Por último, la teoría de problemas inversos en grafos cuánticos, aunque no se estudió en este trabajo, constituye una de las áreas más activas y ricas de la matemática contemporánea. Actualmente se han estudiado diversos problemas para árboles y grafos compactos, incluyendo también algunos resultados para grafos con un número finito de aristas, pero que incluyen aristas de longitud infinita. Sin embargo, existen pocos resultados sobre problemas inversos para grafos periódicos, por lo que es interesante explorar los problemas para este caso, así como desarrollar métodos numéricos para la resolución de dichos problemas.

Bibliografía

- [1] M. A. AL-GWAIZ , *Sturm-Liouville Theory and its Applications*, Springer-Verlag, 2008.
- [2] R. BALAKRISHNAN, K. RANGANATHAN, *A Textbook of Graph Theory*, 2nd. Edition, Springer, 2012.
- [3] V. BARRERA-FIGUEROA, V. S. RABINOVICH, *Effective numerical method of spectral analysis of quantum graphs*, J. Phys. A: Math. Theor. 50(2017)215207.
- [4] V. BARRERA-FIGUEROA, V. S. RABINOVICH, M. MALDONADO-ROSAS, *Numerical estimates of the essential spectra of quantum graphs with delta-interactions at vertices*, Applicable Analysis, DOI: 10.1080/00036811.2017.1419201
- [5] D. BARSEGHYAN, A. KHRABUSTOVSKIYI, *Gaps in the spectrum of a periodic quantum graph with periodically distributed δ' -type interactions*, J. Phys. A: Math. Theor. 48 (2015),255201.
- [6] G. BERKOLAIKO, P. KUCHMENT, *Introduction to Quantum Graphs (Mathematical Surveys and Monographs Vol. 186)*, American Mathematical Society, 2013.
- [7] H. BREZIS, *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*, 1st. Edition, Springer, 2010.
- [8] H. CAMPOS, V. V. KRAVCHENKO, S. M. TORBA, *Transmutations, L-bases and complete families of solutions of the stationary Schrödinger equation in the plane*, J. Math. Anal. Appl. 389 (2012), no. 2, 1222–1238.
- [9] M. S. P. EASTHAM, *The Spectral Theory of Periodic Differential Equations*, Scottish Acad. Press. Ltd., Edinburgh-London, 1973.
- [10] P. EXNER, *A duality between Schrödinger operators on graphs and certain Jacobi matrices*, Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor., 66(4), 359-371,1997.
- [11] G. B. FOLLAND, *Real Analysis, Modern Techniques and Their Applications*, 2nd. Edition, Wiley Interscience, USA, 1999.

- [12] D. HILLTON, P. W. SCHAEFER, *Spectral Theory and Computational Methods of Sturm-Liouville Problems*, Marcel Dekker Inc. 1960.
- [13] K. V. KHMELNYTSKAYA, V. V. KRAVCHENKO, S. M. TORBA, S. TREMBLAY, *Wave polynomials and Cauchy's problem for the Klein-Gordon equation*, J. Math. Anal. Appl. 399 (2013), 191–212.
- [14] V.V. KRAVCHENKO, *A representation for solutions of the Sturm-Liouville equation*, Complex Variables and Elliptic Problems v. 53 issue 8 2008 775-789.
- [15] V. V. KRAVCHENKO, L. J. NAVARRO, S. M. TORBA, *Representation of solutions to the one-dimensional Schrödinger equation in terms of Neumann series of Bessel functions*, Appl. Math. Comput. 314 (2017) 173–192.
- [16] V. V. KRAVCHENKO, R. M. PORTER, *Spectral parameter power series for Sturm-Liouville problems*, Mathematical Methods in the Applied Sciences, 33 (2010) 459-468.
- [17] V. V. KRAVCHENKO, S. M. TORBA, U. VELASCO-GARCÍA, *Spectral parameter power series for Sturm-Liouville equations with a potential polynomially dependent on the spectral parameter and Zakharov-Shabat systems*, Journal of Mathematical Physics, 56, 073508 (2015).
- [18] E. KREYSZIG, *Introductory functional analysis with applications*, 2nd. Edition, Wiley, New York, 1978.
- [19] C. S. KUBRUSLY , *Spectral Theory of Operators on Hilbert Spaces*, Birkhäuser, 2012.
- [20] P. KUCHMENT , *Quantum Graphs: I. Some basic structures*, Waves Random Media, 12(4), S107-S128, 2004, Special section of quantum graphs.
- [21] P. KUCHMENT , *Quantum Graphs: II. Some spectral properties of quantum and combinatorial graphs*, J. Phys. A: Math. Gen. 38 (2005) 4887.
- [22] P. KUCHMENT, O. POST, *On the spectra of carbon nano-structure*, Commun. Math. Phys. 275,805-826(2007).
- [23] P. KURASOV, F. STENBERG, *On the inverse scattering problem on branching graphs*, J. Phys. A: Math. Gen. 35(2002)101.
- [24] P. KURASOV , *Schrödinger Operators on graphs and Geometry I: Essentially bounded potentials*, J. Funct. Anal. 254 (2008) 934-953.
- [25] D. LENZ, C. SCHUBERT, P.STOLLMAN, *Eigenfunction expansions for Schrödinger operators on metric graphs*, Integr. Equ. Oper. Theor. 62 (2008), 4,541 - 533.
- [26] V. A. MARCHENKO, *Sturm-Liouville Operators and Applications*, Birkhäuser-Verlag, 1986.
- [27] J. R. MUNKRES, *Topology*, 2nd. Edition, Prentice Hall Inc., 2000.

- [28] V. S. RABINOVICH, S. ROCH, *Pseudodifferential operators on periodic graphs*, S. Integr. Equ. Oper. Theory (2012) 72: 197.
- [29] G. SALICRUP, *Introducción a la topología*, Sociedad Matemática Mexicana, 1997.
- [30] K. SCHMÜDGEN, *Unbounded Self-adjoint Operators on Hilbert Space*, Springer, 2012.
- [31] A. TALMAGE, *Computing the Dispersion Relation of Periodic Quantum Graphs*, Spring 2015, Paper 121 (http://openscholarship.wustl.edu/wushta_spr2015/121).