



$$I = \begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}.$$

#### DIAONALIZACIÓN. AUTOVALORES Y AUTOVECTORES. EJERCICIOS Y COMPLEMENTOS

En algunas ocasiones, desgraciadamente más de las deseadas, el entendimiento entre matemáticos, físicos e ingenieros resulta complicado. Sin duda, esto supone un grave inconveniente cuando un equipo multidisciplinar debe trabajar en equipo para resolver un determinado problema. O simplemente cuando se estudia un grado de Ingeniería y las asignaturas más aplicadas usan conceptos y resultados impartidos en asignaturas básicas como las Matemáticas de primerero. Sucedé que, a veces, matemáticos, físicos e ingenieros hablan de lo mismo pero usando un lenguaje. Por ejemplo, si un matemático habla de un *endomorfismo entre dos espacios vectoriales*, posiblemente nadie, salvo otro matemático, le entenderá. De igual manera, si el ingeniero habla con un matemático puro sobre el *tensor de esfuerzos*, entonces será el matemático quien no le entenderá. Sin embargo, ambos hablan de lo mismo: de una *matriz cuadrada*, básicamente. Conviene pues conocer algunos sinónimos que favorezcan esta comunicación. Recogemos a continuación algunos de estos "sinónimos" (ponemos " porque realmente algunos de ellos no son sinónimos, pero favorecen la comunicación):

$\mathbb{R}^2$	=	espacio bi-dimensional	=	el plano
$\mathbb{R}^3$	=	espacio tri-dimensional	=	el espacio
base de un espacio vectorial	=	sistema de referencia		
endomorfismo en $\mathbb{R}^n$ , $n = 2, 3$	=	tensor en el plano o en el espacio	=	operador lineal
espectro de un operador	=	valores propios de una matriz		

Cuadro 1: Algunos sinónimos que conviene conocer.

Con frecuencia, físicos e ingenieros hablan de *elementos o magnitudes invariante*s. Por ejemplo, las deformaciones principales de un sólido elástico son invariantes *por cambios de sistemas de referencia*. Traducido al lenguaje matemático esto significa que los autovalores son conceptos asociados a una aplicación lineal (o endomorfismo) y por tanto, independientes de la base del espacio vectorial que se esté usando, es decir, independientes de la matriz que usemos para representar dicha aplicación lineal. Sin duda el más famoso de estos invariantes es un tensor. Un tensor no es una matriz cuadrada, un tensor (de orden 2 dirían los físicos) es el elemento invariante subjacente a una matriz, es decir, una aplicación lineal.

1. Consideremos el tensor  $T: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$  definido como  $T(x, y) = (2x - y, x + 4y)$ . Si consideramos el sistema de referencia habitual en Física  $B = \left\{ \vec{i} = (1, 0), \vec{j} = (0, 1) \right\}$ , es decir la base canónica de  $\mathbb{R}^2$  o base de las coordenadas cartesianas, entonces  $T$  está representado por la matriz

$$T_1 = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}$$

es decir,  $T_1 = M_{B \rightarrow B}(T)$ . Si consideramos ahora un nuevo sistema de referencia, es decir, una nueva base  $B' = \{\vec{v}_1 = (1, -1), \vec{v}_2 = (3, 2)\}$ , entonces el tensor  $T$  viene representado por la matriz

$$T_2 = \begin{pmatrix} 3 & -5 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Comprueba que los autovalores de las matrices  $T_1$  y  $T_2$  son iguales y que los autovectores también son los mismos, sin embargo, las coordenadas de estos últimos dependen del sistema de referencia que estemos usando. No podía ser de otra forma: los autovalores son independientes del sistema de referencia. Y los autovectores también, pero en el sentido de que dependen solamente del tensor aunque sus coordenadas cambien según la matriz que usemos para representar el tensor.

2. Tensor de inercia de un sólido rígido. En Mecánica del Sólido Rígido, el llamado *tensor de inercia* en un punto es una aplicación lineal que, como todas, se representa por medio de una matriz (en este caso

simétrica) que denotaremos por  $I$ . Las llamadas *direcciones principales de inercia* se corresponden con los autovectores de  $I$  mientras que los *momentos principales de inercia* son los autovalores. Supongámos que el tensor de inercia en coordenadas cartesianas de un sólido bidimensional viene dado por

$$I = \begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}.$$

Calcula los momentos principales y las direcciones principales de inercia de  $I$ .

*Interpretación geométrica:* Consideraremos la elipse de ecuación  $5x^2 + 8xy + 5y^2 = 1$ . Dibuja, con Máxima, dicha ellipse. Comprueba que, con la ayuda de la matriz  $I$  anterior, la ecuación de la elipse puede escribirse en la forma

$$(x, y) \begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1.$$

Los autovalores de  $I$  son 9 y 1 y sus autovectores asociados (de norma uno) son  $\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1)$  y  $\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1)$ . La matriz de cambio de base  $P$  que contiene los autovectores es ortogonal con lo que  $P^{-1} = P^T$ . Por tanto, se tiene la descomposición

$$\begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 9 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Si multiplicamos por la izquierda por  $(x, y)$  y por la derecha por  $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$  se tiene la identidad

$$5x^2 + 8xy + 5y^2 = 9 \left( \frac{x+y}{\sqrt{2}} \right)^2 + 1 \left( \frac{x-y}{\sqrt{2}} \right)^2$$

lo que indica que con el cambio de variables  $X = \frac{x+y}{\sqrt{2}}$  y  $Y = \frac{x-y}{\sqrt{2}}$  la ecuación de la elipse es  $9X^2 + Y^2 = 1$ . Dibújala con Máxima esta nueva elipse. *Importante:* Observa que lo que acabamos de hacer es escribir la elipse en las direcciones principales de inercia y que el mayor autovalor 9 se corresponde a la dirección de menor inercia mientras que el autovalor 1 tiene asociado el autovector de mayor inercia.

3. Elasticidad Lineal [4]. Se supone que el tensor de pequeñas deformaciones  $\epsilon$  en un entorno de un punto de un sólido elástico trabajando a deformación plana viene dado por

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 120 & -80 \\ -80 & 100 \end{pmatrix} \cdot 10^{-6}.$$

Calcula las deformaciones principales (autovalores) y direcciones principales de deformación (autovectores normalizados, es decir, de módulo 1). *Interpretación geométrica:* la misma que en el ejercicio anterior. *Solución:*  $\epsilon_1 = (110 + 10\sqrt{65}) \cdot 10^{-6}$ ,  $\epsilon_2 = (110 - 10\sqrt{65}) \cdot 10^{-6}$

$$\bar{n}_1 = (\mp 0.7497, \mp 0.6618), \quad \bar{n}_2 = (\mp 0.6618, \mp 0.7497)$$

4. La teoría de Hückel en Química Orgánica [2]. Esta teoría analiza la posibilidad para algunos tipos de moléculas de tener propiedades aromáticas. Aplicada al ciclobutadiene  $C_4H_4$ , aparece asociado el problema de autovalores

$$HC = EC$$

donde  $H$  representa el Hamiltoniano efectivo de un  $\pi$  electrón del sistema, los autovalores  $E$  de  $H$  son las energías orbitales de los  $\pi$  electrones, y los autovectores  $C$  representan las correspondientes orbitales moleculares. En concreto,

$$H = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix},$$

donde  $\alpha, \beta$  números reales negativos. Comprueba que los autovalores de  $H$  son  $E_1 = \alpha + 2\beta$ ,  $E_2 = E_3 = \alpha$ ,  $E_4 = \alpha - 2\beta$ , y que  $C_1 = (1, 1, 1, 1)$ ,  $C_2 = (0, 1, 0, -1)$ ,  $C_3 = (1, 0, -1, 0)$ ,  $C_4 = (1, -1, 1, -1)$  son autovectores asociados.

Matriz	Definición	Autovalores	Autovectores
Simétrica	$A = A^T$	$\lambda$ 's reales	
Definida positiva	$x^T A x > 0$	$\lambda > 0$	
de Markov	$m_{ij} > 0, \sum_{i=1}^n m_{ij} = 1$	$\lambda_{\max} = 1$	$\vec{v}_j(\lambda_{\max}) > 0$
Triangular	$-1, 2, -1$ sobre las diagonales	$\lambda_k = 2 - 2 \cos \frac{k\pi}{n+1}$	$\vec{v}_k = \left( \sin \frac{k\pi}{n+1}, \sin \frac{2k\pi}{n+1}, \dots \right)$

Cuadro 2: Tabla de autovalores y autovectores de algunas matrices.

⑤ **Algunos tipos destacados de matrices.** Recogemos en la siguiente tabla algunos tipos de matrices importantes en las aplicaciones junto con las propiedades de sus autovalores y autovectores:

Determinar de qué tipo son cada una de las siguientes matrices y calcular sus autovalores y autovectores:

$$M_1 = \begin{pmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{pmatrix} \quad M_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad M_3 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad M_4 = \begin{pmatrix} 5 & 0 & -4 \\ 0 & 3 & 0 \\ -4 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

6. Calcula la potencia  $n$ -ésima de las matrices  $M_1$  y  $M_4$  del ejercicio anterior.

⑦ Dada la matriz

$$M = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & b \\ 4 & 0 & a \end{pmatrix}$$

estudiar para qué valores de los parámetros  $a$  y  $b$  es diagonalizable.

⑧ Responde a las siguientes cuestiones:

a) Sea  $f : V \rightarrow V$  una aplicación lineal y supongamos que  $\lambda = 0$  es un autovalor de  $f$ . ¿Es  $f$  inyectiva? ¿Por qué?

b) Sea  $A$  una matriz invertible y sean  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  los autovalores de  $A$ . ¿Cuáles son los autovalores de  $A^{-1}$ ? ¿Qué relación existe entre los autovectores de  $A$  y los de  $A^{-1}$ ? ¿Por qué?

9. **Teorema de Perron-Frobenius** [3]. El teorema que sigue es una pieza clave en el algoritmo *PageRank*, que usa *Google* para ordenar las páginas de Internet. En su versión más sencilla, el Teorema de Perron-Frobenius se enuncia así: Sea  $A$  una matriz cuadrada con entradas positivas, es decir,  $a_{ij} > 0$ . Entonces existe un autovalor simple (es decir, de multiplicidad 1) cuyo autovector asociado tiene todas sus componentes estrictamente positivas. Calcula los autovalores y autovectores de la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

y comprueba que se satisface el Teorema de Perron-Frobenius.

10. **El secreto de Google y el Álgebra Lineal.** Se recomienda la lectura del artículo [1] a aquellos alumnos que tengan curiosidad por saber las Matemáticas usadas en el algoritmo *PageRank* de Google. En particular, se podrá apreciar el papel destacado del Teorema de Perron-Frobenius.

## Referencias

- [1] P. Fernández, El secreto de Google y el Álgebra Lineal. Disponible en <http://www.sema.org.es/documentos/Fernandez-google.pdf>
- [2] E. Stein, The Chemistry Maths book, Oxford University Press, 1996.
- [3] G. Strang, Introduction to Linear Algebra, Wellesley - Cambridge Press, 2009.
- [4] S. Torrano, D. Herrero, Apuntes de Elasticidad y Resistencia de Materiales (Lección 2). Disponible en [http://ocu.bib.upct.es/pluginfile.php/5464/mod\\_resource/content/1/T2-deformaciones\\_1.pdf](http://ocu.bib.upct.es/pluginfile.php/5464/mod_resource/content/1/T2-deformaciones_1.pdf)

2) Cálculo de potencias n-ésimas de matrices.

Si  $A \in M_{n \times n}$  es diagonalizable, entonces

$$A = P D P^{-1}$$

Por tanto,

$$A^2 = P D P^{-1} \cdot P D P^{-1} = P D^2 P^{-1}$$

- - - - -

$$A^n = P D^n P^{-1}$$

y si  $D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$ , entonces

$$D^2 = \begin{pmatrix} \lambda_1^2 & 0 \\ 0 & \lambda_n^2 \end{pmatrix}$$

- - - -

$$D^n = \begin{pmatrix} \lambda_1^n & 0 \\ 0 & \lambda_n^n \end{pmatrix}.$$

Ejemplo. (Ejercicio 7).

$$M_1 = \begin{pmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{pmatrix}$$

$$|M_1 - \lambda I_2| = \begin{vmatrix} 0.8 - \lambda & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \begin{array}{l} \lambda_1 = 1 \\ \lambda_2 = 0.5 \end{array}$$

Autovalores	Multiplicidad
$\lambda_1 = 1$	$m(\lambda_1 = 1) = 1$
$\lambda_2 = 0.5$	$m(\lambda_2 = 0.5) = 1$

$$\boxed{\lambda_1 = 1} \quad \ker(A - I_2).$$

$$\begin{pmatrix} -0.2 & 0.3 \\ 0.2 & -0.3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$v_1 = (0.3, 0.2)$$

$$\boxed{\lambda_2 = 0.5} \quad \ker(A - 0.5I_2)$$

$$\begin{pmatrix} 0.3 & 0.3 \\ 0.2 & 0.2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow v_2 = (-1, 1)$$

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{pmatrix} \quad P = \begin{pmatrix} 0.3 & -1 \\ 0.2 & 1 \end{pmatrix}$$

$$P^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ -0.4 & 0.6 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} H^n &= P D^n P^{-1} = \begin{pmatrix} 0.3 & -1 \\ 0.2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (0.5)^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ -0.4 & 0.6 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0.6 + 0.4(0.5)^n & 0.6 - 0.6(0.5)^n \\ 0.4 - 0.4(0.5)^n & 0.4 + 0.6(0.5)^n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

## DIAGONALIZACIÓN . EJERCICIOS Y COMPLEMENTOS

① Propiedad: Los valores propios de una matriz son invariantes por cambios de sistemas de referencia. En efecto, si

$$A\vec{v} = \lambda\vec{v}, \text{ es decir } \lambda \text{ es un valor propio de } A, \text{ y}$$

$A = M_{B \rightarrow B}(P)$ , entonces si elegimos otra base  $B'$ , se tiene  $A = P Q P^{-1}$  con  $Q = M_{B' \rightarrow B'}(f)$ .

Veamos que  $\lambda$  es un valor propio de  $Q$ . ↗

Se tiene:

$$A\vec{v} = (P Q P^{-1})\vec{v} = \lambda\vec{v}.$$

Multiplicando por la izquierda por  $P^{-1}$ :

$$P^{-1}A\vec{v} = Q P^{-1}\vec{v} = \lambda P^{-1}\vec{v}$$

Por tanto,  $P^{-1}\vec{v}$  es un vector propio de  $Q$  asociado al valor propio  $\lambda$ . Es decir, los valores propios de  $A$  y  $Q$  son los mismos.

①  $T(x, y) = (2x - y, x + 4y)$

~~$T(1, 0) = (2, 1)$~~

$T(0, 1) = (-1, 4)$

$$M_{B \rightarrow B}(T) = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix} = T_1.$$

$B' = \{ \vec{v}_1 = (1, -1), \vec{v}_2 = (3, 2) \}$

$$\begin{aligned} T(\vec{v}_1) &= (3, -3) = 3 \cdot (1, -1) + 0 \cdot (3, 2) \rightarrow M_{B' \rightarrow B}(T) = \begin{pmatrix} 3 & -5 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \\ T(\vec{v}_2) &= (4, 11) = -5 \cdot (1, -1) + 3 \cdot (3, 2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 |T_1 - \lambda I| &= \begin{vmatrix} 2-\lambda & -1 \\ 1 & 4-\lambda \end{vmatrix} = (2-\lambda)(4-\lambda) + 1 \\
 &= 8 - 2\lambda - 4\lambda + \lambda^2 + 1 \\
 &= \lambda^2 - 6\lambda + 9 = 0 \\
 \lambda &= \frac{6 \pm \sqrt{36 - 36}}{2} = 3
 \end{aligned}$$

$$\lambda_1 = 3 \quad m(\lambda_1 = 3) = 2.$$

$$|T_2 - \lambda I| = \begin{vmatrix} 3-\lambda & -5 \\ 0 & 3-\lambda \end{vmatrix} = (3-\lambda)^2 = 0 \Rightarrow \lambda = 3. \quad (m(\lambda = 3) = 2);$$

⑧ a)  $f: V \rightarrow V$  lineal,  $\lambda = 0$  autovector de  $f$ . ¿Es  $f$  inyectiva?

¿Por qué?

$f$  inyectiva  $\Leftrightarrow \ker f = \{0\}$ .

Si  $\lambda = 0$  es un autovector de  $f$ , entonces, por definición, existe

$$\vec{v} \neq 0 \text{ t.q. } f(\vec{v}) = \lambda \vec{v} = 0 \cdot \vec{v} = 0.$$

Por tanto,  $\vec{v} \in \ker f \Rightarrow \ker f \neq \{0\} \Rightarrow f$  no es inyectiva.

b)  $\lambda_1$  autovector de  $A \Rightarrow \exists \vec{v}_1 \neq 0 : A \vec{v}_1 = \lambda_1 \vec{v}_1$ .

Multiplicando por  $A^{-1}$  se tiene

$$\vec{v}_1 = A^{-1} A \vec{v}_1 = \lambda_1 A^{-1} \vec{v}_1 \Rightarrow A^{-1} \vec{v}_1 = \frac{1}{\lambda_1} \vec{v}_1$$

Notese que como  $A$  es invertible  $\Rightarrow \lambda_j \neq 0, 1 \leq j \leq n$ .

Los autovectores de  $A^{-1}$  son  $\lambda_1^{-1}, \lambda_2^{-1}, \dots, \lambda_n^{-1}$ .

$$\textcircled{7} \quad M = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & b \\ 4 & 0 & a \end{pmatrix}$$

$$|M - \lambda I| = \begin{vmatrix} 5-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -1-\lambda & b \\ 4 & 0 & a-\lambda \end{vmatrix} = (5-\lambda)(-1-\lambda)(a-\lambda) = 0$$

Autovalores	Multiplicidad
$\lambda_1 = 5$	1, $a \neq 5$ , 2 si $a = 5$
$\lambda_2 = -1$	1 si $a \neq -1$ , 2 si $a = -1$
$\lambda_3 = a$	1 si $a \neq -1$ o $a \neq 5$

Caso  $a = 5$

$$\lambda_1 = 5 \quad m(\lambda_1 = 5) = 2$$

$$\lambda_2 = -1 \quad m(\lambda_2 = -1) = 1.$$

$\boxed{\lambda_1 = 5} \quad \ker(A - 5I)$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -6 & b \\ 4 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} -6y + bz = 0 \\ 4x = 0 \end{cases}$$

$$x = 0; \quad -6y + bz = 0 \quad \begin{cases} b=0 \rightarrow y=0 \rightarrow z=\alpha \\ b \neq 0 \rightarrow 6y = bz = b\alpha \end{cases}$$

$$b=0 \rightarrow \dim(\ker(A-5I)) = 1 \rightarrow \text{No diagonalizable} \quad \stackrel{y=0}{y = \frac{b}{6}\alpha}$$

$$b \neq 0 \rightarrow \dim(\ker(A-5I)) = 1 \rightarrow \text{No diagonalizable}$$

Caso  $\alpha = -1$

$$\lambda_1 = 5 \quad m(\lambda_1 = 5) = 1$$

$$\lambda_2 = -1 \quad m(\lambda_2 = -1) = 2.$$

$\boxed{\lambda_2 = -1} \quad \ker(A + I)$

$$\begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \\ 4 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{array}{l} 6x = 0 \\ bz = 0 \\ 4x = 0 \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \\ \\ b=0 \end{array} \right. \rightarrow$$

$x = 0$ . Dos casos:

$$b=0 \rightarrow y=\alpha, z=\beta \rightarrow \vec{v}_1 = (0, 1, 0), \vec{v}_2 = (0, 0, 1)$$
$$\dim \ker(A + I) = 2.$$

$$b \neq 0 \rightarrow z=0 \rightarrow \dim \ker(A + I) = 1.$$

Caso  $\alpha \neq -1, \alpha \neq 5$

$\rightarrow$  Diagonalizable pues los 3 autovectores son distintos.

#### ④ Ciclobutadiene $C_4H_4$

$$H \ C = E \ C$$

$H \equiv$  Hamiltoniano

$E \equiv$  autovalores (energías orbitales de  $\pi$ -electrones)

$C \equiv$  autovectores (coeficientes, en una combinación lineal de orbitales atómicos, de un orbital molecular).

$$H = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

$$|H - EI| = \begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 & \beta \\ \beta & \alpha - E & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha - E & \beta \\ \beta & 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = \cancel{\alpha - E}$$

$$= (\alpha - E) \begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 \\ \beta & \alpha - E & \beta \\ 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix}$$

$$-\beta \begin{vmatrix} \beta & 0 & \beta \\ \beta & \alpha - E & \beta \\ 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix}$$

$$-\beta \begin{vmatrix} \beta & 0 & \beta \\ \alpha - E & \beta & 0 \\ \beta & \alpha - E & \beta \end{vmatrix}$$

$$= (\alpha - E) \cancel{(\alpha - E)^3 - \beta^2(\alpha - E)} - \beta^2(\alpha - E)$$

$$\cancel{- \beta (\alpha - E)^2 + \beta^2(\alpha - E)}$$

$$\cancel{- \beta (\beta^3 + \beta(\alpha - E)^2 - \beta^3)}$$

$$= (\alpha - E)^2 \cancel{((\alpha - E) - 2\beta^2)} - 2\beta^2(\alpha - E)^2$$

$$= 2(\alpha - E)^2 + (\alpha - E)^2 - 2\beta^2$$

$$= (\alpha - E) \left( (\alpha - E)^3 - 2\beta^2(\alpha - E) \right)$$

$$= \beta \left( \beta(\alpha - E)^2 + \beta^3 - 2\beta^3 \right)$$

$$= \beta \left( \beta^3 + \beta(\alpha - E)^2 - \beta^3 \right)$$

$$= (\alpha - E)^2 \left[ (\alpha - E)^2 - 2\beta^2 - 2\beta^2 \right]$$

$$= (\alpha - E)^2 [ (\alpha - E) + 2\beta ] [ (\alpha - E) - 2\beta ] = 0$$

Autovectores

$$E_1 = \alpha + 2\beta \quad \text{multiplicidad } 1$$

$$E_4 = \alpha - 2\beta \quad " \quad 1$$

$$E_2 = E_3 = \alpha \quad " \quad 2.$$

Niveles de energía orbital:

$$\begin{array}{c} \uparrow E \\ E_4 = \alpha - 2\beta \\ E_2 = E_3 = \alpha \\ \downarrow E_1 = \alpha + 2\beta \end{array}$$

## Cálculo de autovectores

$$E_1 = \alpha + 2\beta \quad \ker(H - E_1 I)$$

$$\begin{pmatrix} -2\beta & \beta & 0 & \beta \\ \beta & -2\beta & \beta & 0 \\ 0 & \beta & -2\beta & \beta \\ \beta & 0 & \beta & -2\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\left. \begin{array}{l} -2\beta x_1 + \beta x_2 + \beta x_4 = 0 \\ \beta x_1 - 2\beta x_2 + \beta x_3 = 0 \\ \beta x_2 - 2\beta x_3 + \beta x_4 = 0 \\ \beta x_1 + \beta x_3 - 2\beta x_4 = 0 \end{array} \right\}$$

Como  $\dim(\ker(H - E_1 I)) \geq 1$  y menor que la multiplicidad de  $E_1$ , entonces  $\dim(\ker(H - E_1 I)) = 1$ . Tomamos 1 parámetro.

$$\left. \begin{array}{l} x_4 = \lambda \rightarrow -2\beta x_1 + \beta x_2 = -\beta \lambda \\ \beta x_1 - 2\beta x_2 + \beta x_3 = 0 \\ \beta x_2 - 2\beta x_3 = -\beta \lambda \\ \beta x_1 + \beta x_3 = 2\beta \lambda \end{array} \right\} \rightarrow$$

$$2\beta x_1 = \beta x_2 + \beta \lambda \quad \rightarrow \quad 2x_1 = 2\lambda \rightarrow x_1 = \lambda$$

$$\beta x_2 + \beta \lambda - 4\beta x_2 + 2\beta x_3 = 0$$

$$\left. \begin{array}{l} -3\beta x_2 + 2\beta x_3 = -\beta \lambda \\ \beta x_2 - 2\beta x_3 = -\beta \lambda \end{array} \right\} \rightarrow \begin{array}{l} -2\beta x_2 = -2\beta \lambda \\ x_2 = \lambda \end{array}$$

$$\beta x_3 = 2\beta \lambda - \beta x_1 = 2\beta \lambda - \beta \lambda = \beta \lambda \rightarrow x_3 = \lambda$$

$$E_1 = \alpha + 2\beta \rightarrow \vec{v}_1 = (1, 1, 1, 1)$$

$$\boxed{E_4 = \alpha - 2\beta} \quad \ker(H - E_4 I)$$

$$\begin{pmatrix} 2\beta & \beta & 0 & \beta \\ \beta & 2\beta & \beta & 0 \\ 0 & \beta & 2\beta & \beta \\ \beta & 0 & \beta & 2\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{se obtiene } \vec{v}_4 = (1, -1, 1, -1).$$

$$\boxed{E_2 = E_3 = \alpha} \quad \ker(H - \alpha I)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & \beta & 0 & \beta \\ \beta & 0 & \beta & 0 \\ 0 & \beta & 0 & \beta \\ \beta & 0 & \beta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\left. \begin{array}{l} \beta x_2 + \beta x_4 = 0 \\ \beta x_1 + \beta x_3 = 0 \\ \beta x_2 + \beta x_4 = 0 \\ \beta x_1 + \beta x_3 = 0 \end{array} \right\} \rightarrow \begin{array}{l} x_2 = -x_4 = \lambda \\ x_1 = -x_3 = \mu \end{array}$$

Dos autovectores

$$\vec{v}_2 = (0, 1, 0, -1) \leftarrow \lambda = 1, \mu = 0$$

$$\vec{v}_3 = (1, 0, -1, 0) \leftarrow \lambda = 0, \mu = 1.$$