VALORES Y VECTORES PROPIOS

1. Dada la matriz
$$A = \begin{bmatrix} 14 & 28 & -12 & 4 \\ -6 & -12 & 6 & -2 \\ -3 & -5 & 5 & 1 \\ 7 & 17 & -7 & 5 \end{bmatrix}.$$

   a) Determina los valores propios y los vectores propios asociados. ¿Cual es la multiplicidad algebraica y geométrica de cada valor propio? Calcula los subespacios asociados a cada valor propio.

   b) Calcula el polinomio característico $p(\lambda)$ y comprueba que sus raíces son los valores propios. Comprueba que la matriz A anula el polinomio característico, es decir, $p(A) = 0$

2. La teoría molecular de Huckel nos describe la estructura electrónica de las moléculas a partir de su matriz hamiltoniana: los valores propios de esta matriz son las energías de los electrones externos y sus correspondientes vectores propios son sus estados cuánticos. Se llama degeneración de un nivel de energía al número de electrones o estados cuánticos que tienen esa energía.

   a) El hamiltoniano de la molécula de Butadieno es
$$H = \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ b & a & b & 0 \\ 0 & b & a & b \\ 0 & 0 & b & a \end{bmatrix}$$
   donde a y b son ciertas constantes.

      1) Determina las energías y los estados cuánticos de los cuatro electrones más externos de esta molécula. ¿Son los estados ortogonales?. ¿Cuál es la degeneración de cada nivel de energía?

      2) ¿Hay algún valor de b para el cual esos cuatro electrones tienen la misma energía?. ¿Son en este caso los estados ortogonales?

   b) Considérese ahora el caso del butadieno con $a = b = 1$.

      1) La evolución en el tiempo de un estado partiendo de un estado inicial $\vec{u}$ viene dado por $e^{itH}\vec{u}$, que puede aproximarse por la función
$$\vec{v}(t, \vec{u}) = \left(I + itH - \frac{t^2}{2} H^2 \right) \vec{u},$$
      donde i es la unidad imaginaria, I es la matriz identidad y H es el hamiltoniano. Define con Mathematica la función $v(t, \vec{u})$.

      2) Determina el estado de mínima energía λ_1 y el vector propio asociado $\vec{v}_1$. Calcula con estos datos $\vec{v}(t, \vec{v}_1)$ y la función $\vec{w}_1(t) = (1 + it\lambda_1 - t^2\lambda_1^2/2)\vec{v}_1$. ¿Que relación hay entre $\vec{w}_1(t)$ y $\vec{v}(t, \vec{v}_1)$?. ¿Por qué?.

      3) Calcula $\vec{w}_3(t) = (1 + it\lambda_3 - t^2\lambda_3^2/2)\vec{v}_3$, donde λ_3 es el tercer valor propio (considerando los valores propios ordenados de menor a mayor) y $\vec{v}_3$ es su correspondiente vector propio.

      4) Calcula $\vec{v}(t, \vec{v}_0)$ siendo $\vec{v}_0 = \vec{v}_1 + \vec{v}_3$. ¿Que relación existe entre el vector $\vec{w}_1(t) + \vec{w}_3(t)$ y el vector $\vec{v}(t, \vec{v}_0)$?. Interpreta el resultado.