

9. Selbstadjungiertheit bei tridiagonalen Operatoren

In der folgenden Definition fassen wir eine Situation zusammen, die uns in der Quantenmechanik des öfteren begegnet.

Definition 9.1

Es sei E ein \mathbb{C} -Hilbertraum und $(e_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Folge paarweise orthonormaler Vektoren in E . S sei der endliche Spann aller Elemente dieser Folge und der lineare Operator $A : D(A) \subseteq E \rightarrow E$ mit der Eigenschaft $S \subseteq D(A) \subseteq E$ werde gegeben durch die Dreiterm-Beziehung

$$Ae_k = \alpha_k e_{k-1} + \beta_k e_k + \gamma_k e_{k+1} \quad \alpha_k, \beta_k, \gamma_k \in \mathbb{C} \quad (366)$$

wobei $k \in \mathbb{N}_0, \alpha_0 = 0$. Dann heisst A **tridiagonaler Operator** auf $D(A)$. Die Doppelfolge $(m_{ij})_{i,j \in \mathbb{N}_0}$, gegeben durch

$$m_{ij} := (e_i, Ae_j) \quad i, j \in \mathbb{N}_0 \quad (367)$$

heisst **tridiagonale Matrixdarstellung** des Operators A bezüglich der Orthogonalfolge $(e_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$.

Von besonderem Interesse für die Quantenmechanik sind die symmetrischen und selbstadjungierten Operatoren, da die ihnen zugrundeliegenden Spektralsätze die komplette quantenmechanische Information über das zu betrachtende System mathematisch modellieren. Ausserdem sind diese Begriffe zentral beim Studium von approximationstheoretischen Methoden zur Lösung der Schrödinger-Gleichung, wie es in vielen realistischen Szenarien der Fall ist.

Nachdem wir im zweiten bzw. fünften Kapitel dieser Vorlesung den Begriff des symmetrischen bzw. selbstadjungierten Operators eingeführt haben, wollen wir in diesem Kapitel vor allem Kriterien für Selbstadjungiertheit im Falle von tridiagonalen Operatoren kennenlernen. Um diese Aussagen systematisch zu erarbeiten, beginnen wir zunächst mit der Charakterisierung der Selbstadjungiertheit eines Operators A durch die Reellität des Ausdrucks (Ax, x) , wobei x alle Elemente des Definitionsbereichs von A durchläuft. Dies ist Gegenstand von

Theorem 9.2

Es sei $A : D(A) \subseteq E \rightarrow E$ ein linearer Operator auf seinem Definitionsbereich in einem \mathbb{C} -Hilbertraum E . A ist selbstadjungiert genau dann, wenn für alle $x \in D(A)$ die Beziehung $(Ax, x) = (x, Ax) = (x, A^*x) \in \mathbb{R}$ gilt.

Beweis

Es sei A selbstadjungierter Operator. Dann gilt für alle $x, y \in D(A) = D(A^*)$:

$$(Ax, y) = (x, A^*y) = (x, Ay) \quad (368)$$

Insbesondere erhalten wir hieraus

$$(Ax, x) = (x, A^*x) = (x, Ax) = \overline{(Ax, x)} \quad (369)$$

was die Reellität des Ausdrucks (Ax, x) zeigt.

Es sei jetzt umgekehrt für jedes $x \in D(A)$ der Ausdruck (Ax, x) reell. D.h.

$$(Ax, x) = (x, A^*x) = (x, Ax) \quad (370)$$

Wir erhalten dann folgende Implikationen:

$$x \in D(A) \Rightarrow (Ax, x) = (x, Ax) \Rightarrow (x, A^*x) = (A^*x, x) \Rightarrow x \in D(A^*),$$

d.h. $D(A) \subseteq D(A^*)$. Wir wollen jetzt umgekehrt unter der Voraussetzung $\forall x \in D(A) : (Ax, x) \in \mathbb{R}$ auch zeigen, dass $D(A^*) \subseteq D(A)$. Wir nehmen zunächst an, es gebe ein $u \in D(A^*)$, so dass

$$(A^*u, u) \neq (u, A^*u)$$

Dann erhalten wir den Widerspruch

$$\exists u \in D(A^*) : (A^*u, u) \neq (u, A^*u) \Leftrightarrow (u, Au) \neq (Au, u)$$

Hieraus folgt nämlich einerseits $u \in D(A)$, aber andererseits wissen wir auch, dass

$$\forall x \in D(A) : (x, Ax) = (Ax, x)$$

d.h. es muss insgesamt gelten

$$\forall x \in D(A^*) : (A^*x, x) = (x, A^*x)$$

Dies ist gleichbedeutend zu

$$\forall x \in D(A^*) : (A^*x, x) = (x, A^*x) \Leftrightarrow (Ax, x) = (x, Ax)$$

d. h. es gilt mit $x \in D(A^*)$ schließlich auch $x \in D(A)$, daher $D(A^*) \subseteq D(A)$ und somit insgesamt $D(A) = D(A^*)$.

Es ist jetzt zu zeigen, dass für alle $x, y \in D(A)$ folgendes gilt:

$$(Ax, y) = (x, A^*y) = (x, Ay) \quad (371)$$

Unter der Voraussetzung der Reellität von (Az, z) für alle $z \in D(A)$ gelten für alle $x, y \in D(A)$ die Beziehungen

$$(A(x+y), x+y) = (x+y, A(x+y)) \quad (A(x+iy), x+iy) = (x+iy, A(x+iy)) \quad (372)$$

Berechnen wir die Skalarprodukte und verwenden die Beziehungen $(Ax, x) = (x, Ax)$ und $(Ay, y) = (y, Ay)$, so gewinnen wir

$$(Ay, x) + (Ax, y) = (y, Ax) + (x, Ay) \quad (Ay, x) - (Ax, y) = (y, Ax) - (x, Ay) \quad (373)$$

Subtrahieren wir diese Beziehungen voneinander, so erhalten wir für alle $x, y \in D(A)$ das Ergebnis

$$(Ax, y) = (x, A^*y) = (x, Ay), \quad (374)$$

d.h. A ist ein selbstadjungierter Operator.

Obwohl dieses Kriterium auf den ersten Blick sehr handlich aussieht, so ist doch die Selbstadjungiertheit im Detail in vielen Fällen nicht einfach zu verifizieren. Bei den tridiagonalen Operatoren jedoch gibt es explizite Kriterien zur Selbstadjungiertheit, die an den Elementen des zugeordneten tridiagonalen Matrixschemas abgelesen werden können. Diese Kriterien herzuleiten, wird eines der Ziele dieses Kapitels sein. Das soeben bewiesene Theorem 9.2 wird hierbei sehr hilfreich sein.

Wir fahren fort mit einem Begriff, der wesentlich schwächer als der der Symmetrie oder sogar der der Selbstadjungiertheit eines linearen Operators ist.

Definition 9.3

Es sei $A : D(A) \subseteq E \rightarrow E$ mit $S \subseteq D(A)$ tridiagonaler linearer Operator auf seinem Definitionsbereich. A heisst **formal symmetrisch**, sofern

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : (Ae_m, e_n) = (e_m, Ae_n) \quad (375)$$

Es gilt das folgende

Lemma 9.4

Es sei $A : D(A) \subseteq E \rightarrow E$ tridiagonaler linearer Operator mit $S \subseteq D(A)$. Falls A symmetrisch ist, so ist A formal symmetrisch, jedoch gilt die Umkehrung dieser Aussage im allgemeinen nicht. Ist A tridiagonaler formal symmetrischer linearer Operator mit $S \subseteq D(A)$, so gilt für die Indices in der Darstellung (366) die Beziehung $\gamma_k = \overline{\alpha_{k+1}}$, $k \in \mathbb{N}_0$, d. h. insgesamt

$$Ae_k = \alpha_k e_{k-1} + \beta_k e_k + \overline{\alpha_{k+1}} e_{k+1} \quad k \in \mathbb{N}_0 \quad (376)$$

Der Beweis des Lemmas ist relativ einfach und kann weggelassen werden, für das Gegenbeispiel siehe im fünften Kapitel die Illustration 5.11 dieser Vorlesung.

Wir benutzen das Ergebnis von Lemma 9.4, um mit dem folgenden Theorem ein wichtiges Normierungsverfahren für orthogonale Polynome herzuleiten.

Theorem 9.5

Es seien $(a_n)_{n \in \mathbb{N}_0}, (c_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ Folgen positiver reeller Zahlen, $(b_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Folge reeller Zahlen, d.h. es gelte insbesondere $\frac{c_{n+1}}{a_n} > 0$ für alle $n \in \mathbb{N}_0$. Weiterhin seien die Funktionen $p_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben durch die rekursive Vorschrift

$$xp_n(x) = a_n p_{n+1}(x) + b_n p_n(x) + c_n p_{n-1}(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad (377)$$

mit Anfangsbedingungen $p_0(x) = 1, p_{-1}(x) := 0$. Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^+$ eine positive Funktion mit den Eigenschaften

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n f(x) dx < \infty \quad \int_{-\infty}^{\infty} p_m(x) p_n(x) f(x) dx = 0 \quad (378)$$

für alle paarweise verschiedenen $m, n \in \mathbb{N}_0$. Mit den rekursiv definierten Zahlen

$$\nu_{n+1} = \sqrt{\frac{c_{n+1}}{a_n}} \nu_n \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad \nu_0 \in \mathbb{R}^+ \quad (379)$$

erfüllen die Polynome $P_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, gegeben durch

$$P_n(x) := \frac{p_n(x)}{\nu_n} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (380)$$

die Normierungsbeziehung

$$\int_{-\infty}^{\infty} P_n(x) P_n(x) f(x) dx = \frac{1}{\nu_0} \int_{-\infty}^{\infty} p_0(x) p_0(x) dx \quad (381)$$

Beweis

Für die im Theorem definierten Polynome P_n folgt aus der Rekursionsgleichung für p_n folgende Beziehung

$$x \nu_n P_n(x) = a_n \nu_{n+1} P_{n+1}(x) + \nu_n b_n P_n(x) + \nu_{n-1} c_n P_{n-1}(x), \quad (382)$$

die gleichbedeutend ist zu

$$x P_n(x) = \frac{a_n \nu_{n+1}}{\nu_n} P_{n+1}(x) + \nu_n P_n(x) + \frac{\nu_{n-1} c_n}{\nu_n} P_{n-1}(x) \quad (383)$$

Vereinbaren wir auf dem komplexen endlichen Spann P aller Polynome $P_n, n \in \mathbb{N}_0$ die Multiplikationsabbildung X durch

$$(Xp)(x) := xp(x) \quad p \in P, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (384)$$

statten wir fernerhin P mit Hilfe von

$$(u, v)_P := \int_{-\infty}^{\infty} u(x) \overline{v(x)} f(x) dx \quad u, v \in P \quad (385)$$

durch ein Skalarprodukt aus, so erhalten wir insbesondere

$$(X P_m, P_n)_P = (P_m, X P_n)_P \quad (386)$$

X kann daher als formal symmetrischer linearer Operator auf $D(X) \subseteq E$ aufgefasst werden, wobei $E = \overline{S}$ der Abschluss des komplexen Spans S aller Vektoren $e_n, n \in \mathbb{N}_0$ ist, die aus der Normierung der orthogonalen Polynome $p_n, n \in \mathbb{N}_0$ hervorgehen. Insbesondere gilt $S \subseteq D(X) \subseteq E$. Damit können wir auf X die Situation von Lemma 9.4 anwenden und erhalten

$$\alpha_{n+1} = \overline{\alpha_{n+1}} = \frac{a_n \nu_{n+1}}{\nu_n} \quad \alpha_n = \frac{\nu_{n-1} c_n}{\nu_n} \quad (387)$$

wobei $n \in \mathbb{N}_0$. Vergleich dieser Ausdrücke liefert somit die Beziehung

$$\frac{\nu_{n+1} a_n}{\nu_n} = \frac{\nu_n c_{n+1}}{\nu_{n+1}} \quad (388)$$

oder gleichbedeutend zu

$$\nu_{n+1} = \nu_n \sqrt{\frac{c_{n+1}}{a_n}} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (389)$$

Dies war gerade die Behauptung.

Theorem 9.6 Carleman-Kriterien der Selbstadjungiertheit

Es sei $A : D(A) \subseteq E \rightarrow E$ formal symmetrischer tridiagonaler Operator mit $S \subseteq D(A)$. Die Wirkung des Operators auf die Elemente der Orthogonalbasis $(e_k)_{k \in \mathbb{N}_0}$ werde gegeben durch

$$Ae_k = b_{k-1}e_{k-1} + a_k e_k + b_k e_{k+1} \quad k \in \mathbb{N}_0 \quad (390)$$

mit $a_k \in \mathbb{R}, k \in \mathbb{N}_0$ und $b_k > 0, k \in \mathbb{N}_0$ und $b_{-1} := 0$. Weiterhin seien die Polynome $P_k : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}, k \in \mathbb{N}_0$ rekursiv gegeben durch die Beziehung

$$zP_k(z) = b_k P_{k+1}(z) + a_k P_k(z) + b_{k-1} P_{k-1}(z) \quad k \in \mathbb{N}_0 \quad (391)$$

mit Anfangsbedingungen $P_{-1}(z) := 0, z \in \mathbb{C}$ und $P_0(z) = 1, z \in \mathbb{C}$. Dann gelten folgende Kriterien:

1. Divergiert die Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2$ für alle nichtreellen $\alpha \in \mathbb{C}$, so ist der Operator A^* selbstadjungiert.
2. Konvergiert die Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2$ für ein nichtreelles $\alpha \in \mathbb{C}$, so ist A nicht selbstadjungiert.
3. Divergiert die Zahlenfolge

$$s_j := \sum_{n=1}^j \frac{1}{b_n} \quad (392)$$

für $j \rightarrow \infty$, so ist A^* ein selbstadjungierter Operator.

Beweis

Wir zeigen zunächst den zweiten Teil, nämlich dass für nichtreelles $\alpha \in \mathbb{C}$ aus der Konvergenz der Reihe

$$\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2 \quad (393)$$

folgt, dass der Operator A nicht selbstadjungiert ist. Aus der Konvergenz dieser Reihe im Falle $\alpha = i$ folgt zunächst, dass ein Element

$$x = \sum_{k=0}^{\infty} P_k(i)e_k \quad (394)$$

existiert, für das gilt:

$$(x, x) < \infty \quad (x, e_k) = P_k(i) \quad (395)$$

Aus der Wirkung von A auf die Basisvektoren e_k ,

$$Ae_k = b_{k-1}e_{k-1} + a_k e_k + b_k e_{k+1} \quad (396)$$

folgt somit

$$(Ae_k, x) = b_{k-1}(e_{k-1}, x) + a_k(e_k, x) + b_k(e_{k+1}, x) \quad (397)$$

Mit Hilfe der zweiten Beziehung in (395) erbringt dies

$$(Ae_k, x) = b_{k-1}\overline{P_{k-1}(i)} + a_k\overline{P_k(i)} + b_k\overline{P_{k+1}(i)} \quad (398)$$

was wegen der Gleichung (391) äquivalent ist zu

$$(Ae_k, x) = -i\overline{P_k(i)} \quad (399)$$

Wegen $(e_k, x) = \overline{P_k(i)}$ liefert dies

$$(Ae_k, x) = (e_k, ix) \quad (400)$$

Somit gilt für jedes Element y des endlichen komplexen Spanns der Elemente e_n , dass

$$(Ay, x) = (y, ix) \Leftrightarrow (y, A^*x + ix) = 0 \quad (401)$$

woraus folgt:

$$A^*x = ix \quad (402)$$

Dies bedeutet aber, dass A nicht selbstadjungiert sein kann. Dieser Beweis lässt sich für jedes nichtreelle $\alpha \in \mathbb{C}$ genauso hinschreiben. Wir haben damit gezeigt, dass die Reihe (393), falls sie für ein nichtreelles $\alpha \in \mathbb{C}$ konvergiert, nach sich zieht, dass A nicht selbstadjungiert ist. Damit ist Teil 3 des Theorems bewiesen.

Um den ersten Teil des Theorems zu verifizieren, zeigen wir als nächstes, dass die Konvergenz der Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(i)|^2$ nicht verträglich ist mit der Erfüllung der Gleichung $A^*x = ix$ für ein $x \in D(A^*)$, $x \neq 0$.

Wir nehmen an, es gelte $A^*x = ix$ für ein $x \neq 0 \in D(A^*)$. Nach Voraussetzung ist z. B. der k -te Einheitsvektor e_k in $D(A)$. Es gilt also

$$(Ae_k, x) = (e_k, A^*x) = (e_k, ix) = -ix_k \quad (403)$$

wobei x_k dem k -ten Entwicklungskoeffizienten in $x = \sum_{j=0}^{\infty} x_j e_j$ entspricht. Somit gilt auch

$$(x, Ae_k) = ix_k \quad (404)$$

Schreiben wir die Wirkung von A auf e_k aus, so erbringt dies

$$(x, b_{k-1}e_{k-1} + a_k e_k + b_k e_{k+1}) = ix_k \quad (405)$$

Berechnung des Skalarprodukts auf der linken Seite liefert damit

$$b_{k-1}x_{k-1} + a_k x_k + b_k x_{k+1} = ix_k \quad (406)$$

Aus dieser Gleichung folgt mit Hilfe von (391) die Identität

$$x_k = P_k(i)x_0 \quad (407)$$

mit $x_0 \neq 0$. Wegen $(x, x) = \sum_{k=0}^{\infty} |x_k|^2 < \infty$ folgt damit auch

$$(x, x) = |x_0|^2 \sum_{k=0}^{\infty} |P_k(i)|^2 < \infty \quad (408)$$

D.h. die Existenz eines Elementes $x \in D(A^*)$ mit $A^*x = ix$ und die Konvergenz der Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(i)|^2$ können nicht gleichzeitig realisiert werden.

Wir haben damit folgendes gezeigt

$$\exists x \in D(A^*) : A^*x = ix \Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} |P_k(i)|^2 < \infty$$

Dies ist gleichbedeutend zu

$$\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(i)|^2 = \infty \Rightarrow \forall x \in D(A^*) : (A^*x, x) \neq i$$

Genauso wie für i hätten wir wiederum den Beweis für jedes nichtreelle $\alpha \in \mathbb{C}$ führen können, so dass für dieses α das folgende gilt:

$$\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2 = \infty \Rightarrow \forall x \in D(A^*) : (A^*x, x) \neq \alpha$$

Hieraus folgt die nachstehende Kette von Implikationen:

$$\forall \alpha \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} : \sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2 = \infty \Rightarrow$$

$$\forall x \in D(A^*) : \{(A^*x, x)\} \cap \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} = \{ \} \Leftrightarrow \forall x \in D(A^*) : (A^*x, x) \in \mathbb{R}$$

Nach Theorem 9.2 bedeutet dies aber schließlich die Implikation

$$\forall \alpha \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} : \sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2 = \infty \Rightarrow A^* \text{ selbstadjungiert}$$

Dies war zu zeigen. Damit ist Teil 1 des Theorems bewiesen.

Wir zeigen jetzt den dritten Teil des Theorems.

Aus der Beziehung (391) erhalten wir für jedes nichtreelle $\alpha \in \mathbb{C}$ den Ausdruck

$$b_k \frac{P_{k+1}(\alpha) \overline{P_k(\alpha)} - \overline{P_{k+1}(\alpha)} P_k(\alpha)}{\alpha - \bar{\alpha}} = |P_k(\alpha)|^2 + b_{k-1} \frac{P_k(\alpha) \overline{P_{k-1}(\alpha)} - \overline{P_k(\alpha)} P_{k-1}(\alpha)}{\alpha - \bar{\alpha}} \quad (409)$$

Summation über k von $k = 0$ bis $k = n$ liefert jetzt

$$\sum_{k=0}^{n-1} |P_k(\alpha)|^2 = b_{n-1} \frac{P_n(\alpha) \overline{P_{n-1}(\alpha)} - \overline{P_n(\alpha)} P_{n-1}(\alpha)}{\alpha - \bar{\alpha}} \quad (410)$$

Wegen $P_0(\alpha) = 1$, können wir die letzte Gleichung wie folgt abschätzen

$$1 \leq b_{n-1} \frac{P_n(\alpha) \overline{P_{n-1}(\alpha)} - \overline{P_n(\alpha)} P_{n-1}(\alpha)}{\alpha - \bar{\alpha}} \quad (411)$$

Auswertung des Ausdrucks auf der rechten Seite erbringt

$$1 \leq b_{n-1} \frac{J(\overline{P_n(\alpha)} P_{n-1}(\alpha))}{\alpha - \bar{\alpha}} \quad (412)$$

Hierbei bedeute J die Imaginärteilbildung.

Die vorhergehende Beziehung können wir wiederum abschätzen durch

$$\frac{\alpha - \bar{\alpha}}{b_{n-1}} \leq |\overline{P_n(\alpha)}| |P_{n-1}(\alpha)| \quad (413)$$

Eine letzte Abschätzung liefert

$$\frac{\alpha - \bar{\alpha}}{2b_{n-1}} \leq |P_n(\alpha)|^2 + |P_{n-1}(\alpha)|^2 \quad (414)$$

Summieren wir auf beiden Seiten der Ungleichung über n , so erkennen wir folgendes:

Divergiert die Zahlenfolge $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{b_n}$, so divergiert auch für jedes nichtreelle $\alpha \in \mathbb{C}$ die Zahlenfolge

$$\sum_{n=0}^{\infty} |P_n(\alpha)|^2 \quad (415)$$

Nach dem ersten Teil des Theorems folgt damit aber die Selbstadjungiertheit von A^* , so dass wir insgesamt folgendes gezeigt haben:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{b_n} = \infty \quad \Rightarrow \quad A^* \text{ selbstadjungiert}$$

Dies erbringt den Beweis für den dritten Teil des Theorems.