Opdracht 2 - Deeltje in periodieke potentiaal

Gunar Stevens
Tweede Bachelor Fysica en Sterrenkunde 12-17 december 2023

Vraag 1

Herschrijf de differentiaalvergelijking als een eerste orde differentiaalvergelijking voor de fundamentele oplossingsmatrix

$$\mathsf{Z}(x) = \begin{bmatrix} u_{\lambda,1}(x) & u_{\lambda,2}(x) \\ u'_{\lambda,1}(x) & u'_{\lambda,2}(x) \end{bmatrix} \tag{1}$$

Per definitie van een fundamentele oplossingsmatrix weet men dat:

$$\frac{\mathrm{d}\mathsf{Z}}{\mathrm{d}x}(x) = \mathsf{A}(x)\mathsf{Z}(x) \tag{2}$$

Waarbij $\mathsf{A}(x)$ afhankelijk is van de differentiaalvergelijking, deze wordt namelijk voor een 2^e orde differentiaalvergelijking gegeven door:

$$\mathsf{A}(x) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{a_0(x)}{a_2(x)} & -\frac{a_1(x)}{a_2(x)} \end{bmatrix} \tag{3}$$

Hier zijn $a_j(x)$ de coefficiënten in $\sum_{j=0}^{2} a_j(x) \frac{\mathrm{d}^j u_n}{\mathrm{d}x^j}(x)$. Voor de gegeven homogene 2^e orde differentiaalvergelijking

$$-u_n''(x) + (V(x) - \lambda_n)u_n(x) = 0 \tag{4}$$

luiden deze: $a_0(x) = V(x) - \lambda_n$, $a_1(x) = 0$ en $a_2(x) = -1$. Zo verkrijgen we $\mathsf{A}(x)$:

$$\mathsf{A}(x) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ V(x) - \lambda_n & 0 \end{bmatrix} \tag{5}$$

Invullen in vergelijking 2 geeft de gezochte differentiaalvergelijking:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \begin{bmatrix} u_{\lambda,1}(x) & u_{\lambda,2}(x) \\ u'_{\lambda,1}(x) & u'_{\lambda,2}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ V(x) - \lambda_n & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\lambda,1}(x) & u_{\lambda,2}(x) \\ u'_{\lambda,1}(x) & u'_{\lambda,2}(x) \end{bmatrix} \tag{6}$$

Vraag 2

Toon aan dat, onder de milde voorwaarde dat B gediagonaliseerd kan worden (wat we verderop aannemen), we de basisoplossingen dus kunnen kiezen als

$$u_{\lambda,1}(x) = q_{\lambda,1}(x)e^{b_{\lambda,1}x}, u_{\lambda,2}(x) = q_{\lambda,2}(x)e^{b_{\lambda,2}x} \tag{7}$$

Als we aannemen dat B diagonaliseerbaar is, volgt dit uit *Remark 8.19.* Zo krijgen we:

$$\boldsymbol{z}(x) = \boldsymbol{q}(x)e^{\lambda x} \tag{8}$$

Waarbij we $x_0 = 0$ hebben gekozen. Zo kunnen we λ substitueren met de eigenwaarden van B: $b_{\lambda,1}$ en $b_{\lambda,2}$. Deze substitutie voorziet ons van twee vergelijkingen die het gevraagde impliceren.

Vraag 3

a)

Wanneer we nu de randvoorwaarden $u_\lambda(0) = u_\lambda(L)$ en $u'_\lambda(0) = u'_\lambda(L)$ opleggen, toon dan aan dat we enkel een niet-triviale oplossing kunnen vinden als voldaan is aan de vergelijking

$$(1 - e^{b_1 L})(1 - e^{b_2 L})\det\left(\begin{bmatrix} q_1(0) & q_2(0) \\ q'_1(0) + b_1 q_1(0) & q'_2(0) + b_2 q_2(0) \end{bmatrix}\right) = 0 \tag{9}$$

Bij aanname dat $1 \neq e^{b_1 L}$ en $1 \neq e^{b_2 L}$ reduceert bovenstaande vergelijking zich tot de vorm:

$$0 = \det\left(\begin{bmatrix} q_1(0) & q_2(0) \\ q'_1(0) + b_1 q_1(0) & q'_2(0) + b_2 q_2(0) \end{bmatrix}\right) \tag{10}$$

Implicerende:

$$q_1(0)(q'_2(0) + b_2 q_2(0)) = q_2(0)(q'_1(0) + b_1 q_1(0)) \tag{11}$$

Wat later van pas zal komen. Nu richten we ons op de randvoorwaarden, deze luiden: $u_\lambda(0) = u_\lambda(L)$ en $u'_\lambda(0) = u'_\lambda(L)$. Vullen we deze randvoorwaarden in in de algemene vorm $u_\lambda(x) = c^1 u_{\lambda,1}(x) + c^2 u_{\lambda,2}(x) = c^1 q_{\lambda,1}(x) e^{b_{\lambda,1} x} + c^2 q_{\lambda,2}(x) e^{b_{\lambda,2} x}$ verkrijgen we twee lineaire vergelijkingen in c^1 en c^2:

$$\begin{cases} c^1(q_1(L)e^{b_1 L} - q_1(0)) + c^2(q_2(L)e^{b_2 L} - q_2(0)) = 0 \\ c^1(q'_1(0) + b_1 q_1(0) - q'_1(L)e^{b_1 L} - b_1 q_1(L) e^{b_1 L}) + c^2(q'_2(0) + b_2 q_2(0) - q'_2(L) e^{b_2 L} - b_2 q_2(L) e^{b_2 L}) = 0 \end{cases} \tag{12}$$

Uit vraag 2 volgt $q_i(x) = q_i(x + Na)$ en $q'_i(x) = q'_i(x + Na)$ met $N \in \mathbb{N}$. Ook weten we dat L een geheel aantal keer deze periode is, oftewel $L = Na$, en dus: $q_i(0) = q_i(L)$ en $q'_i(0) = q'_i(L)$. Zo worden bovenstaande vergelijkingen:

$$\begin{cases} c^1 q_1(0)(e^{b_1 L} - 1) + c^2 q_2(0)(e^{b_2 L} - 1) = 0 \\ c^1(e^{b_1 L} - 1)(q'_1(0) + b_1 q_1(0)) + c^2(e^{b_2 L} - 1)(q'_2(0) + b_2 q_2(0)) = 0 \end{cases} \tag{13}$$

Merk op dat als $1 = e^{b_1 L} = e^{b_2 L}$,[1] beide vergelijkingen zich reduceren tot $0 = 0$, en dus dat c^1 en c^2 niet worden vastgezet, zo zijn de twee eerste factoren in vergelijking 9 wel degelijk noodzakelijk. Vormen we de eerste vergelijking om naar c^2 krijgen we: $c^2 = -c^1 \frac{q_1(0)(e^{b_1 L} - 1)}{q_2(0)(e^{b_2 L} - 1)}$. Invullen in de tweede vergelijking geeft:

$$c^1 \underbrace{(q'_1(0) + b_1 q_1(0) - \frac{q_1(0)}{q_2(0)}(q'_2(0) + b_2 q_2(0))}_{=0} = 0 \tag{14}$$

Waarvan we via vergelijking 11 weten dat de tweede factor gelijk is aan nul. Mocht vergelijking 9 niet gelden, dan zou ook hier de tweede factor niet gelijk zijn aan nul, en dus zou $c^1 = 0$ (via uitdrukking voor c^2 ook $c^2 = 0$).

b)

Toon verder ook aan dat de laatste factor, m.a.w. de determinant, in bovenstaande vergelijking niet nul kan worden wanneer $u_{\lambda,1}(x)$ en $u_{\lambda,2}(x)$ lineair onafhankelijke oplossingen zijn.

Lineaire afhankelijkheid tussen $u_{\lambda,1}(x)$ en $u_{\lambda,2}(x)$ kan gedetermineerd worden via de *Wronksiaan* (**Definition 8.5**). Ook weten we dat de Wronskiaan nul wordt voor lineair afhankelijke functies. De Wronskiaan wordt hier gegeven door:

$$W(x) = \det\left(\begin{bmatrix} u_{\lambda,1}(x) & u_{\lambda,2}(x) \\ u'_{\lambda,1}(x) & u'_{\lambda,2}(x) \end{bmatrix}\right) \tag{15}$$

[1] De vergelijkingen in 13 zijn niet geconstrueerd op de voorgaande aanname dat $e^{b_2 L} \neq 1 \neq e^{b_1 L}$.

Evalueren in $x = 0$ en onze uitdrukkingen voor $u_{\lambda,1}(x)$ en $u_{\lambda,2}(x)$ uit Vraag 2 invullen geeft:

$$W(0) = \det\left(\begin{bmatrix} q_1(0) & q_2(0) \\ q_1'(0) + b_1 q_1(0) & q_2'(0) + b_2 q_2(0) \end{bmatrix}\right) \tag{16}$$

Waarbij de laatste factor in vergelijking 9 precies deze Wronskiaan is, en dus kan deze determinant niet nul worden wanneer $u_{\lambda,1}(x)$ en $u_{\lambda,2}(x)$ lineair onafhankelijk zijn.

Vraag 4

Voor een gegeven waarde van $b = \mathrm{i}\kappa = \mathrm{i}\frac{2\pi}{L}k$ met dus $\kappa \in [0, 2\pi/a)$ gaan we nu dus op zoek naar eigenvectoren van de vorm

$$u_\kappa(x) = q_\kappa(x)e^{\mathrm{i}\kappa x} \tag{17}$$

met $q_\kappa(0) = q_\kappa(a)$ en $q_\kappa'(0) = q_\kappa'(a)$. Vul deze uitdrukking in in de eigenwaardevergelijking om een nieuwe differentiaalvergelijking voor $q_\kappa(x)$ te vinden.

Deze uitdrukking voor $u_\kappa(x)$ invullen in vergelijking 4 geeft:

$$-e^{\mathrm{i}\kappa x}(q_\kappa''(x) + 2\mathrm{i}\kappa q_\kappa'(x) - \kappa^2 q_\kappa(x)) + (V(x) - \lambda)q_\kappa e^{\mathrm{i}\kappa x} = 0 \tag{18}$$

We weten dat $e^{\mathrm{i}\kappa x}$ geen nul kan zijn, en dus kunnen we bovenstaande vergelijking verder uitwerken tot volgende differentiaalvergelijking voor $q_\kappa(x)$:

$$-q_\kappa''(x) - 2\mathrm{i}\kappa q_\kappa'(x) + (\kappa^2 + V(x) - \lambda)q_\kappa(x) = 0 \tag{19}$$

Vraag 5

Toon aan dat deze potentiaal een trigonometrische polynoom is op $[0, a]$, i.e. dat je hem kan schrijven als een eindige lineaire combinatie van termen uit $\exp(\mathrm{i}\frac{2\pi}{a}kx), k \in \mathbb{Z}$.

De potentiaal $V(x) = V_0 \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)$ valt via $\sin^2(cx) = \frac{1-\cos(2cx)}{2}$ te herschrijven als:

$$V(x) = V_0\left(\frac{1 - \cos(\frac{2\pi}{a}x)}{2}\right) \tag{20}$$

Nu valt de $\cos(\frac{2\pi}{a}x)$ term te herschrijven als een som van twee exponentiëlen via de formule van Euler: $e^{icx} = \cos(cx) + \mathrm{i}\sin(cx)$ als:

$$\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) = \frac{1}{2}(e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x}) \tag{21}$$

Er volgt:

$$V(x) = \frac{1}{2}V_0 - \frac{1}{4}V_0(e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x}) \tag{22}$$

Vraag 6

$$q_{\kappa,n}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sum_{k\in\mathbb{Z}} \widehat{q}_{\kappa,n,k} e^{i\frac{2\pi}{a}kx}$$

Vul deze uitdrukking in in de differentiaalvergelijking voor q die je in vraag 4 hebt gevonden en bepaal op die manier een relatie waaraan de Fouriercoëfficiënten $\widehat{q}_{\kappa,n,k}$ moeten voldoen.

Vullen we onze Fourierexpansie in in de differentiaalvergelijking uit vraag 4, volgt er[2]:

$$
\begin{aligned}
0 &= -\frac{1}{\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} - 2\frac{\mathrm{i}\kappa}{\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} + \frac{1}{\sqrt{a}}(\kappa^2 + V(x) - \lambda)\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} \\
&= \frac{4\pi^2}{a^2\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}k^2 e^{ikx\frac{2\pi}{a}} + \frac{4\kappa\pi}{a\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}k e^{ikx\frac{2\pi}{a}} + \frac{1}{\sqrt{a}}(\alpha - \frac{1}{4}V_0(e^{ix\frac{2\pi}{a}} + e^{-ix\frac{2\pi}{a}}))\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}e^{ikx\frac{2\pi}{a}}
\end{aligned}
$$

Waarbij $\alpha = \kappa^2 + \frac{1}{2}V_0 - \lambda$. We werken de laatste term verder uit:

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{\sqrt{a}}(\alpha - \frac{1}{4}V_0(e^{ix\frac{2\pi}{a}} + e^{-ix\frac{2\pi}{a}}))\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} \\
&= \frac{\alpha}{\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} - \frac{V_0}{4\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}e^{i(k+1)x\frac{2\pi}{a}} - \frac{V_0}{4\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}e^{i(k-1)x\frac{2\pi}{a}} \\
&= \frac{\alpha}{\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} - \frac{V_0}{4\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k-1}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} - \frac{V_0}{4\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k+1}e^{ikx\frac{2\pi}{a}}
\end{aligned}
$$

Waarbij we de sommatie in de laatste twee termen hebben opgeschoven[3] zodanig dat de exponentïelen in elke sommatie gelijk zijn. Zo wordt de bovenstaande gelijkheid:

$$
\begin{aligned}
0 = &\frac{4\pi^2}{a^2\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}k^2 e^{ikx\frac{2\pi}{a}} + \frac{4\kappa\pi}{a\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}k e^{ikx\frac{2\pi}{a}} \\
&+ \frac{\alpha}{\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} - \frac{V_0}{4\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k-1}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} - \frac{V_0}{4\sqrt{a}}\sum \widehat{q}_{\kappa,n,k+1}e^{ikx\frac{2\pi}{a}}
\end{aligned}
$$

Sinds dat onze sommatiegrenzen identiek zijn voor elke sommatie, mogen we de sommaties samennemen:

$$
\begin{aligned}
0 &= \sum \frac{4\pi^2}{a^2\sqrt{a}}\widehat{q}_{\kappa,n,k}k^2 e^{ikx\frac{2\pi}{a}} + \frac{4\kappa\pi}{a\sqrt{a}}\widehat{q}_{\kappa,n,k}k e^{ikx\frac{2\pi}{a}} + \frac{\alpha}{\sqrt{a}}\widehat{q}_{\kappa,n,k}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} - \frac{V_0}{4\sqrt{a}}\widehat{q}_{\kappa,n,k-1}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} - \frac{V_0}{4\sqrt{a}}\widehat{q}_{\kappa,n,k+1}e^{ikx\frac{2\pi}{a}} \\
&= \sum \frac{1}{\sqrt{a}}e^{ikx\frac{2\pi}{a}}\left(\underbrace{\frac{4\pi^2}{a^2}\widehat{q}_{\kappa,n,k}k^2 + \frac{4\kappa\pi}{a}\widehat{q}_{\kappa,n,k}k + \alpha\widehat{q}_{\kappa,n,k} - \frac{V_0}{4}\widehat{q}_{\kappa,n,k-1} - \frac{V_0}{4}\widehat{q}_{\kappa,n,k+1} = 0}_{=0}\right)
\end{aligned}
$$

We weten dat $\{\frac{1}{\sqrt{a}}\exp(\mathrm{i}\frac{2\pi}{a}kx), k \in \mathbb{Z}\}$ een orthonormale basis vormt voor $L^2([0,a],\mathbb{C})$, en dus dat deze functies lineair onafhankelijk zijn. Dit impliceert dat bovenstaande gelijkheid enkel geldt als de coefficiënten van $\frac{1}{\sqrt{a}}e^{ikx\frac{2\pi}{a}}$ nul zijn voor $\forall k \in \mathbb{Z}$, en dus moet de tweede factor in bovenstaande sommatie nul zijn. Deze voorwaarde geeft:

$$
\begin{aligned}
0 &= \left(\frac{4\pi^2}{a^2}k^2 + \frac{4\kappa\pi}{a}k + \alpha\right)\widehat{q}_{\kappa,n,k} - \frac{V_0}{4}\widehat{q}_{\kappa,n,k-1} - \frac{V_0}{4}\widehat{q}_{\kappa,n,k+1} \\
0 &= \left(\frac{4\pi^2}{a^2}k^2 + \frac{4\kappa\pi}{a}k + \kappa^2 + \frac{V_0}{2} - \lambda\right)\widehat{q}_{\kappa,n,k} - \frac{V_0}{4}\widehat{q}_{\kappa,n,k-1} - \frac{V_0}{4}\widehat{q}_{\kappa,n,k+1} \\
\widehat{q}_{\kappa,n,k} &= \frac{V_0}{4}(\widehat{q}_{\kappa,n,k-1} + \widehat{q}_{\kappa,n,k+1})\left((\frac{2\pi}{a}k + \kappa)^2 + \frac{1}{2}V_0 - \lambda\right)^{-1}
\end{aligned}
$$

Zijnde de gezochte recursierelatie waaraan de Fouriercoëfficiënten moeten voldoen.

[2]We laten voor simpliciteitsredenen de sommatie-variabele k onderaan de sommatie, en de boven- en ondergrens($+\infty$ en -∞ resp.) weg, sinds dat deze voor elke sommatie binnen deze vraag identiek zijn.

[3]Beschouw de 3^e term op de tweede lijn. Men kiest een dummy-variabele bv. $l = k - 1$. Zo verdwijnt de som in de exponentïele en verandert de index van $\widehat{q}$ naar $l + 1$. Vervolgens zet men $l = k$, bij eindige grenzen van de sommatie heeft dit consequenties(de onder- of bovengrens die met 1 opschuift), maar sinds onze grenzen hier $-\infty$ en $+\infty$ zijn, doen deze er niet toe.

Vraag 7

Bepaal nu, als functie van κ, de mogelijke oplossingen van deze vergelijking voor het geval $V_0 = 0$, dus in afwezigheid van de periodieke potentiaal, waar deze relatie exact oplosbaar is. Welke eigenwaarden $\lambda_{\kappa,n}$ en bijbehorende eigenfuncties kan je vinden en hoe relateren deze aan wat je fysisch verwacht in deze situatie? Wat is de kleinste en de grootste waarde van de laagste eigenwaarde $\lambda_{\kappa,n=1}$ als κ varieert in het interval $\kappa = [-\pi/a, +\pi/a)$? Noem het verschil tussen deze waarden ΔE_1, de energie-bandbreedte van de laagste energieband.

Met $V_0 = 0$ wordt bovenstaande recursierelatie:

$$\widehat{q}_{\kappa,n,k}\left((\frac{2\pi}{a}k+\kappa)^2-\lambda\right)=0 \tag{24}$$

Nu willen we een niet-triviale oplossing vinden voor onze differentiaalvergelijking in q_κ, dit impliceert dat er in de Fourierexpansie $q_{\kappa,n}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sum_{k\in\mathbb{Z}}\widehat{q}_{\kappa,n,k}e^{i\frac{2\pi}{a}kx}$ minstens? 1 niet-nul Fourier-coëfficiënt is voor een welbepaalde k. Als de coëfficiënt $\widehat{q}_{\kappa,n,k}$ niet nul is, dan volgt er uit vergelijking 24 dat:

$$\left(\frac{2\pi}{a}k+\kappa\right)^2-\lambda=0 \implies \lambda=\left(\frac{2\pi}{a}k+\kappa\right)^2 \tag{25}$$

Zo worden de eigenfuncties $\{\frac{1}{\sqrt{a}}\exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi}{a}kx\right)\widehat{q}_{\kappa,k}|k\in\mathbb{Z}\}$ met bijbehorende eigenwaarden $\lambda_{\kappa,k} = \left(\frac{2\pi}{a}k+\kappa\right)^2$. Als de laagste eigenwaarde correspondeert met $n = 1$, dan volgt er $k = n - 1$ sinds dat we een laagste eigenwaarde bereiken wanneer $k = 0$, zo worden onze eigenwaarden $\lambda_{\kappa,n} = \left(\frac{2\pi}{a}(n-1)+\kappa\right)^2$. De kleinste en grootste waarde dat $\lambda_{\kappa,n=1}$ kan aannemen met $\kappa \in [-\pi/a, \pi/a)$, zijn $\lambda_{n=1} = 0$ (met $\kappa = 0$) en $\lambda_{n=1} = \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$ (met $\kappa = \pm\pi/a$) respectievelijk. Zo wordt de energie-bandbreedte van de laagste energieband $\Delta E_1 = \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$.

Vraag 8

Los deze eigenwaardevergelijking numeriek op voor $V_0 = 9/a$ en vindt de laagste eigenwaarden $n = 1, 2, 3$ als functie van κ, waarbij je je in bovenstaande parameterisatie zelfs mag beperken tot $N = 1$. Stel deze resultaten voor op een grafiek, waarbij je dus een grid van waarden kiest in $(\pi/a, +\pi/a]$ en waarbij je voor de eenvoud $a = 1$ kan stellen. Het is niet nodig de eigenvectoren te berekenen.

Sinds dat de grenzen van de Fourierreeks $k = -1$ en $k = 1$ worden, bestaat desbetreffende reeks uit drie termen. Zo krijgen we via onze gevonden recursierelatie een stelsel van 3 lineaire vergelijkingen in de drie Fouriercoëfficiënten $\widehat{q}_{k=-1}, \widehat{q}_{k=0}$ en $\widehat{q}_{k=1}$. Dit stelsel luidt:

$$\begin{cases}\widehat{q}_{k=-1}\lambda = \widehat{q}_{k=-1}\left((\kappa-2\pi)^2+\frac{9}{2}\right)-\frac{9}{4}\widehat{q}_{k=0}\\ \widehat{q}_{k=0}\lambda = \widehat{q}_{k=0}(\kappa^2+\frac{9}{2})-\frac{9}{4}\widehat{q}_{k=-1}-\frac{9}{4}\widehat{q}_{k=1}\\ \widehat{q}_{k=1}\lambda = \widehat{q}_{k=1}\left((\kappa+2\pi)^2+\frac{9}{2}\right)-\frac{9}{4}\widehat{q}_{k=0}\end{cases} \tag{26}$$

Wat correspondeert met de eigenwaardenvergelijking $\mathsf{A}x = \lambda x$:

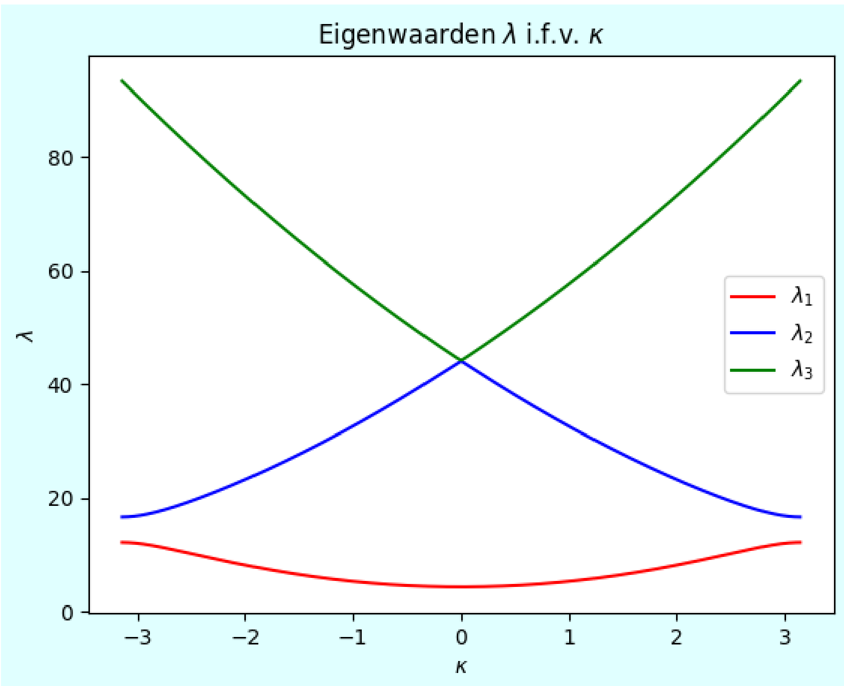
$$\begin{bmatrix}(\kappa-2\pi)^2+\frac{9}{2} & -\frac{9}{4} & 0\\ -\frac{9}{4} & \kappa^2+\frac{9}{2} & -\frac{9}{4}\\ 0 & -\frac{9}{4} & (\kappa+2\pi)^2+\frac{9}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\widehat{q}_{k=-1}\\ \widehat{q}_{k=0}\\ \widehat{q}_{k=1}\end{bmatrix}=\lambda\begin{bmatrix}\widehat{q}_{k=-1}\\ \widehat{q}_{k=0}\\ \widehat{q}_{k=1}\end{bmatrix} \tag{27}$$

Voor de numerieke uitwerking van het probleem keren we ons tot Python.

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def get_diagonal_element(K,k):
    return (K+2*np.pi*k)**2 + 9/2

def get_matrix(K,N = 1):
    concatenated_rows = []
```

```python
    for i in range(-N,N+1):
        for l in range(-N,N+1):
            if i == l:
                concatenated_rows.append(get_diagonal_element(K,i))
            elif abs(i-l) == 1:
                concatenated_rows.append(-9/4)
            else:
                concatenated_rows.append(0)
    return np.array(concatenated_rows).reshape((2*N + 1, 2*N +1))

def get_eigvals(K,N):
    return np.linalg.eigh(get_matrix(K,N))[0].real

K = np.linspace(-np.pi,np.pi,10000)
N = 1

eigvals = []
for kappa in K:
    eigvals.append((get_eigvals(kappa,N)))

fig,ax = plt.subplots()
fig.set_facecolor('lightcyan')

colors = ['red','blue','green']
labels = ['$\lambda_1$','$\lambda_2$','$\lambda_3$']

for i in range(2*N+1):
    ax.plot(K,np.array(eigvals)[:,i],color = colors[i],label = labels[i])

ax.legend()
ax.set_xlabel('$\kappa$')
ax.set_ylabel('$\lambda$')
ax.set_title('Eigenwaarden $\lambda$ i.f.v. $\kappa$')
```

Deze code levert Figuur 1.



Figuur 1: Eigenwaarden $\lambda_{n=1}$,$\lambda_{n=2}$ en $\lambda_{n=3}$ i.f.v. κ met $N = 1$

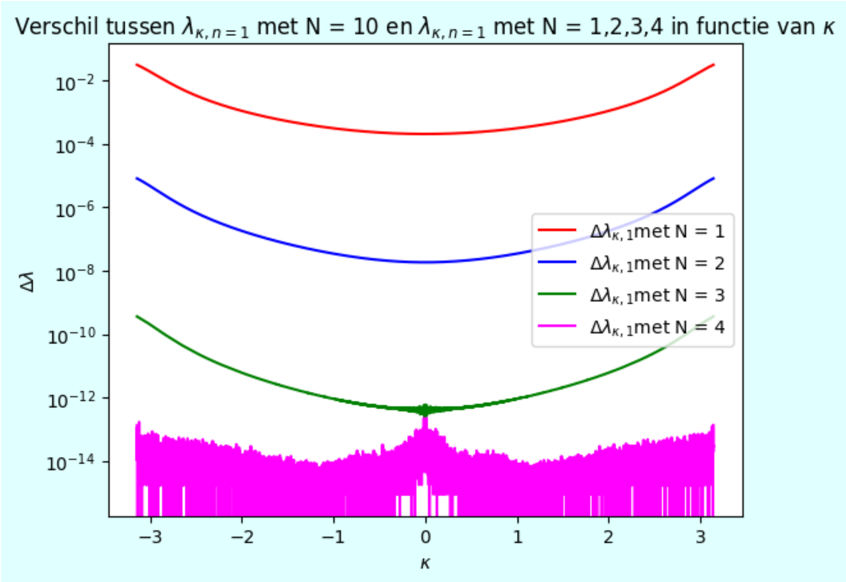
Vraag 9

Toon aan dat de benadering in vorige vraag heel accuraat is, door nu eens dezelfde eigenwaarden $\lambda_{\kappa,1}$ (enkel voor $n = 1$ is voldoende) te berekenen met $N = 1, 2, 3, 4$ en te zien hoeveel deze waarden van elkaar verschillen. Je kan de waarden onderling vergelijken, of bijvoorbeeld de waarde bij $N = 10$ berekenen en als 'exacte' referentie gebruiken, en dan de verschillen ten opzichte hiervan uitzetten. Het kan nuttig zijn om op de y-as een logaritmische schaalverdeling te gebruiken om deze kleine getallen goed te kunnen visualiseren. Waarom ben je zeker dat de gevonden benadering voor de eigenwaarde dalend is naarmate N groter wordt gekozen?

We keren ons wederom tot python.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def get_diagonal_element(K,k):
    return (K+2*np.pi*k)**2 + 9/2

def get_matrix(K,N = 1):
    concatenated_rows = []
    for i in range(-N,N+1):
        for l in range(-N,N+1):
            if i == l:
                concatenated_rows.append(get_diagonal_element(K,i))
            elif abs(i-l) == 1:
                concatenated_rows.append(-9/4)
            else:
                concatenated_rows.append(0)
    return np.array(concatenated_rows).reshape((2*N + 1, 2*N +1))

def get_eigvals(K,N):
    return np.linalg.eigh(get_matrix(K,N))[0].real

def get_eigval_1_ifo_K(K,N):
    eigvals = []
    for kappa in K:
        eigvals.append((get_eigvals(kappa,N)[0]))
    return eigvals

K = np.linspace(-np.pi,np.pi,10000)

fig,ax = plt.subplots()
fig.set_facecolor('lightcyan')

eigval_for_N_is_10 = get_eigval_1_ifo_K(K,10)

colors = ['red','blue','green','magenta']

for i in range(1,5):
    ax.plot(K,abs(np.array(eigval_for_N_is_10) - np.array(get_eigval_1_ifo_K(K,i))),
color = colors[i-1],label = '$\Delta \lambda_{\kappa,1}$'f'met N = {i}')

ax.legend()
ax.set_xlabel('$\kappa$')
ax.set_ylabel('$\Delta\lambda$')
ax.set_yscale('log')
ax.set_title('Verschil tussen $\lambda_{\kappa,n=1}$ met N = 10 en $\lambda_{\kappa,n
=1}$ met N = 1,2,3,4 in functie van $\kappa$')
```

Deze code levert Figuur 2.



Figuur 2: Verschil tussen $\lambda_{\kappa,n=1}$ met $N = 10$ en $\lambda_{\kappa,n=1}$ met $N = 1$(rood), 2(blauw), 3(groen), 4(magenta) in functie van κ.

Het is niet moeilijk om in te zien dat de benadering in vorige vraag accurater wordt naarmate N stijgt, we zien namelijk dat het verschil voor $N = 4$(en een beetje voor $N = 3$) onderhevig is aan computationele afrondingsfouten en dus dat het verschil praktisch verwaarloosbaar is. Als het verschil al zo drastisch daalt voor kleine waarden van N, dan is het verschil tussen bv. de laagste eigenwaarde bij $N = 10$ en die van $N = \infty$(de werkelijke laagste eigenwaarde van het probleem), in zeer goede benadering, gelijk.