
Periodieke Potentiaal

Alternatief

Louis Servaes
Tweede Bachelor Fysica en Sterrenkunde

V&F Project 2
18 december 2023

Opgave

Gegeven de volgende lineaire differentiaaloperator:

$$\hat{L} = -\hat{D}^2 + V(\hat{X}) \quad (1)$$

waarbij $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ een functie is die verder nog wordt gekozen, maar die periodiek is met periode a . Deze differentiaaloperator komt bijvoorbeeld overeen met de *Hamiltoniaan* van een kwantumdeeltje, bijvoorbeeld een elektron, dat in een ééndimensionaal kristal beweegt (of een atoom dat in een optisch rooster van staande lasergolven beweegt), in eenheden waarbij $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$.

Om problemen met continu spectrum en niet-normaliseerbare functies te vermijden, zullen we dit systeem op een eindig interval bekijken met lengte $L = Ma$ voor $M \in \mathbb{N}$, i.e. het interval bevat een geheel aantal periodes. We werken dus binnen de Hilbertruimte $L^2([0, Ma], \mathbb{C})$. De differentiaaloperator werkt op een domein van tweemaal afleidbare functies waar we bovendien extra randvoorwaarden aan opleggen. Voor de eenvoud van de berekeningen kiezen we periodieke randvoorwaarden voor de functies en hun eerste afgeleide, i.e.

$$\mathcal{D}_{\hat{L}} = \{u \in L^2([0, L], \mathbb{C}) \mid u', u'' \text{ bestaan en } u', u'' \in L^2([0, L], \mathbb{C}) \text{ en } u(0) = u(L) \text{ en } u'(0) = u'(L)\}$$

Het is vrij eenvoudig in te zien dat met deze randvoorwaarden de differentiaaloperator zelf-toegevoegd is, of dus een Sturm-Liouville operator is.

In de volgende vragen trachten we het (periodieke) Sturm-Liouville eigenwaardeprobleem benaderend op te lossen:

$$(\hat{L}u_n)(x) = -u_n''(x) + V(x)u_n(x) = \lambda_n u_n(x) \quad (2)$$

met $u_n(0) = u_n(L)$, $u_n'(0) = u_n'(L)$. We hopen dus een reeks eigenwaarden λ_n en bijbehorende eigenfuncties $u_n(x)$ te vinden. In eerste instantie beschouwen we de homogene differentiaalvergelijking:

$$-u_n''(x) + [V(x) - \lambda]u_n(x) = 0 \quad (3)$$

zonder randvoorwaarden. Uit de theorie van beginvoorwaardeproblemen weten we dat er (voor elke waarde van λ) twee lineair onafhankelijke oplossingen $u_{\lambda,1}(x)$ en $u_{\lambda,2}(x)$ bestaan. Het opleggen van de randvoorwaarden zal generiek enkel de triviale oplossing $u(x) = 0$ toelaten, behalve voor specifieke (discrete) waarden van λ , wat dus aanleiding geeft tot de eigenwaarden λ_n .

1. Herschrijf de differentiaalvergelijking in Eq 3 als een eerste orde differentiaalvergelijking voor de fundamentele oplossingsmatrix $Z(x)$:

$$Z(x) = \begin{bmatrix} u_{\lambda,1}(x) & u_{\lambda,2}(x) \\ u'_{\lambda,1}(x) & u'_{\lambda,2}(x) \end{bmatrix} \quad (4)$$

2. Uit het theorema van Floquet weten we dat $Z(x)$ de specifieke structuur:

$$Z(x) = Q(x)e^{Bx} \text{ met } Q(x) = Q(x + ma), m = 1, \dots, M$$

heeft, waarbij $Q(x)$ dus periodiek is met periode a . Toon aan dat, onder de milde voorwaarde dat B diagonaliseerbaar is (wat we verderop aannemen), we de basisoplossingen dus kunnen kiezen als:

$$u_{\lambda,1}(x) = q_{\lambda,1}(x)e^{b_{\lambda,1}x} \quad (5)$$

$$u_{\lambda,2}(x) = q_{\lambda,2}(x)e^{b_{\lambda,2}x} \quad (6)$$

met $b_{\lambda,i} \in \mathbb{C}$ voor $i = 1, 2$ de twee eigenwaarden van B en waarbij $q_{\lambda,i}(x)$ voor $i = 1, 2$ dus moet voldoen aan:

$$q_{\lambda,i}(0) = q_{\lambda,i}(a) \quad (7)$$

$$q'_{\lambda,i}(0) = q'_{\lambda,i}(a) \quad (8)$$

Voor de helderheid hebben we in de notatie expliciet aangeduid dat alles uiteraard afhangt van de waarde van λ in de differentiaalvergelijking. De precieze vorm van deze afhankelijkheid moeten we uiteraard nog bepalen, en zal ook afhangen van $V(x)$.

3. Een willekeurige oplossing van de differentiaalvergelijking bij gegeven λ zal van de vorm zijn:

$$u_{\lambda}(x) = c^1 u_{\lambda,1}(x) + c^2 u_{\lambda,2}(x) = c^1 q_{\lambda,1}(x)e^{b_{\lambda,1}x} + c^2 q_{\lambda,2}(x)e^{b_{\lambda,2}x} \quad (9)$$

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:

$$(1 - e^{b_1 L})(1 - e^{b_2 L}) \det \left(\begin{bmatrix} q_1(0) & q_2(0) \\ q'_1(0) + b_1 q_1(0) & q'_2(0) + b_2 q_2(0) \end{bmatrix} \right) = 0 \quad (10)$$

waarbij we voor de eenvoud van de notatie het subscript λ hebben weggelaten. 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.

Uit bovenstaande resultaat volgt dus dat de randvoorwaarden vereisen dat $e^{b_{\lambda,1}L} = 1$, wat impliceert dat $u_{\lambda,1}(x)$ zelf aan de randvoorwaarden voldoet (m.a.w. $c^2 = 0$ en c^1 arbitrair), of $e^{b_{\lambda,2}L} = 1$, wat impliceert dat $u_{\lambda,2}(x)$ zelf aan de randvoorwaarden voldoet (m.a.w. $c^1 = 0$ en c^2 arbitrair). Kort samengevat, de eigenvectoren zelf zullen dus de structuur:

$$u_{\lambda} = q_{\lambda}(x)e^{b_{\lambda}x} \quad (11)$$

hebben met $q_{\lambda}(0) = q_{\lambda}(a)$ en $q'_{\lambda}(0) = q'_{\lambda}(a)$ en we hoeven geen lineaire combinatie te beschouwen. De randvoorwaarden zijn voldaan wanneer λ zodanig is dat $e^{b_{\lambda}L} = 1$. We draaien nu het probleem om, en zullen zoeken welke eigenwaarden λ we kunnen vinden voor een gegeven oplossing b van de vergelijking $e^{bL} = 1$. Met andere woorden, in plaats van b als een functie van λ te beschouwen, gaan we λ als een functie van b beschouwen. Bij een bepaalde b kunnen meerdere eigenwaarden λ gevonden worden.

Vooreerst merken we op dat de oplossingen van $e^{bL} = 1$ uiteraard gegeven worden door $b = i\frac{2\pi}{L}m$ met $m \in \mathbb{Z}$. In principe zijn de functies $\exp(i\frac{2\pi}{L}mx)$ voor elke geheel getal m lineair onafhankelijk. Echter, aangezien deze functies enkel voorkomen in combinatie met een periodieke functie $q(x)$ met periode a , kunnen we steeds uit $\exp(i\frac{2\pi}{L}mx)$ een stuk afzonderen dat periodiek is met periode $a = L/M$, en dit absorberen in een herdefinitie van q . Met andere woorden, er geldt:

$$q(x)e^{i\frac{2\pi}{L}mx} = q(x)e^{i\frac{2\pi}{Ma}mx} = [q(x)e^{i\frac{2\pi}{a}px}]e^{i\frac{2\pi}{Ma}(m-pM)x} = \tilde{q}(x)e^{i\frac{2\pi}{Ma}(m-pM)x} \quad (12)$$

met hierin een willekeurige $p \in \mathbb{Z}$. Dit impliceert dat het enkel zinvol is om m te laten variëren over bijvoorbeeld $\{0, \dots, M-1\}$.

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

$$u_\kappa(x) = q_\kappa(x)e^{i\kappa x} \quad (13)$$

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

We hebben nu dus een differentiaalvergelijking voor $q_\kappa(x)$, met hierin de parameters κ en λ , die we wensen op te lossen op het interval $[0, a]$, i.e. binnen 1 periode. Nog steeds zal deze homogene differentiaalvergelijking voor elke λ 2 lineair onafhankelijke oplossingen toelaten. Het zijn nu de randvoorwaarden op q die ervoor zullen zorgen dat een niet-nul lineaire combinatie van deze oplossingen enkel toegelaten is voor een discrete set van eigenwaarden $\lambda_{\kappa,n}$, die uiteraard zullen afhangen van de parameter κ . Deze verschillende waarden $\lambda_{\kappa,n}$ als functie van κ bepalen het zogenaamde spectrum van energiebanden van het probleem. Bemerk dat, aangezien we het probleem hebben herleidt tot het fundamenteel interval $[0, a]$, we eigenlijk zonder problemen $L \rightarrow \infty$ of dus $M \rightarrow \infty$ kunnen nemen zonder noemenswaardige problemen. Dit zorgt ervoor dat κ een continue parameter wordt binnen het interval $[0, 2\pi/a[$. Vanuit fysisch oogpunt is het vaak interessanter om de equivalente maar symmetrische keuze $[-\pi/a, +\pi/a[$ te maken. Dit alles hebben we bereikt zonder de expliciete potentiaal te kennen, enkel gebruik makende van de periodiciteit $V(x) = V(x + a)$.

Om de eigenwaarden $\lambda_{\kappa,n}$ en bijbehorende eigenvectoren:

$$u_{\kappa,n}(x) = q_{\kappa,n}(x)e^{i\kappa x} \quad (14)$$

te vinden, moeten we nu natuurlijk de potentiaal $V(x)$ vastleggen. We maken hiervoor nu de bijzondere keuze:

$$V(x) = P_0 \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(x - na) \quad (15)$$

met $P_0 > 0$, die dus een distributie vormt en fysisch enkel kan bekomen worden als een limiet van een potentiaal die een sterk afstotende kracht opwekt rond de punten $x = na$.

5. Herschrijf deze potentiaal als een (distributionele) Fourierreeks.
6. We kiezen nu een basis ten opzichte waarvan we $q_{\kappa,n}(x)$ gaan expanderen. Hoewel in principe elke basis voor $L^2([0, a], \mathbb{C})$ in aanmerking komt, wijzen de randvoorwaarden voor $q_{\kappa,n}(x)$ erop dat het nuttig zal zijn deze te expanderen als een Fourierreeks:

$$q_{\kappa,n}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{q}_{\kappa,n,k} e^{i\frac{2\pi k}{a}x} \quad (16)$$

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 $\hat{q}_{\kappa,n,k}$ moeten voldoen.

7. Bepaal nu, als functie van κ , de mogelijke oplossingen van deze vergelijking voor het geval $P_0 = 0$, 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 $\lambda_{\kappa,1}$ als κ varieert in het interval $[-\pi/a, +\pi/a[$? Noem het verschil tussen deze waarden ΔE_1 , de energie-bandbreedte van de laagste energieband.
8. Toon aan dat, voor P_0 verschillend van nul, je de relatie tussen de Fouriercoëfficiënten kan herleiden tot:

$$\hat{q}_k = \frac{P_0 C}{af(k, \kappa, \lambda)} \quad (17)$$

met hierin $f(k, \kappa, \lambda)$ een zelf te bepalen functie, en:

$$C = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{q}_k = \sqrt{a}q(0) \quad (18)$$

Met andere woorden, wanneer we de uitdrukking voor \hat{q}_k in Eq 17 opnieuw invullen in C , verdwijnt C uit deze vergelijking en krijgen we een zelfconsistentierelatie:

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{P_0}{af(k, \kappa, \lambda)} = 1 \quad (19)$$

waaruit voor gegeven κ verschillende oplossingen λ_n in principe kunnen worden bepaald.

9. Omdat het rechtstreeks oplossen van deze relatie in de vorm van Eq 19 echter niet evident is, nemen we nu een omweg. Toon hiertoe eerst en vooral aan dat de Fouriercoëfficiënten \hat{q}_k in Eq 17 afkomstig zijn van de functie:

$$q(x) = \frac{-iP_0C}{2p\sqrt{a}} \left[\frac{e^{-i(p+\kappa)x}}{e^{-i(p+\kappa)a} - 1} - \frac{e^{i(p-\kappa)x}}{e^{i(p-\kappa)a} - 1} \right] \quad (20)$$

of dus:

$$u(x) = q(x)e^{i\kappa x} = \frac{-iP_0C}{2p\sqrt{a}} \left[\frac{e^{-ipx}}{e^{-i(p+\kappa)a} - 1} - \frac{e^{ipx}}{e^{i(p-\kappa)a} - 1} \right] \quad (21)$$

met hierin:

$$p = \sqrt{\lambda} \quad (22)$$

waarbij we inderdaad mogen veronderstellen dat $\lambda \geq 0$. Toon vervolgens aan dat, wanneer we nu de zelfconsistentierelatie $C = \sqrt{a}q(0)$ willen opleggen, we hieruit kunnen bekomen dat:

$$\cos(\kappa a) = \cos(pa) + \frac{P_0}{2p} \sin(pa) \quad (23)$$

Wanneer we nu het rechterlid voorstellen op een grafiek als functie van $p = \sqrt{\lambda}$, kunnen we de eigenwaarden λ_n horende bij een bepaalde waarde κ aflezen door de snijpunten van de resulterende kromme te vinden met de vlakke rechte met y-waarde $\cos(\kappa a)$. Maak dus zulke grafiek, gebruik makende van de waarden $a = 1$ en $P_0 = 9$, en waarbij je voor λ het interval $[0, 50]$ onderzoekt. Teken de rechte lijnen die overeen komen met $\kappa = 0, \pi/2, \pi$. Bepaalde waarden van $\lambda = p^2$ zullen voor geen enkele waarde van κ een aanleiding kunnen geven tot een oplossing in bovenstaande vergelijking. Duid de intervallen $\lambda = p^2$ waarvoor $\cos(pa) + \frac{P_0}{2p} \sin(pa)$ wel kan snijden met $\cos(\kappa a)$ voor een of andere κ aan op de grafiek.

Vraag 1

Voor de fundamentele matrix $Z(x)$ geldt:

$$\frac{d}{dx}Z(x) = A(x)Z(x)$$

waarbij $A(x)$ periodiek is met periode a (want $V(x)$ is periodiek):

$$A(x) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ V(x) - \lambda & 0 \end{bmatrix}$$

zodat we een eerste orde differentiaalvergelijking bekomen:

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

Vraag 2

Volgens *Remark 8.19*. kunnen oplossingen $\mathbf{z}_i(x) = \begin{bmatrix} u_{\lambda,i}(x) & u'_{\lambda,i}(x) \end{bmatrix}^T$ geschreven worden als:

$$\mathbf{z}_i(x) = \mathbf{q}_i(x)e^{b_{\lambda,i}x}$$

waarbij $\mathbf{q}_i(x)$ (en dus ook $\mathbf{q}'_i(x)$) periodiek is met periode a . Als we kijken naar het eerste element van $\mathbf{z}_i(x)$, dan vinden we:

$$u_{\lambda,i} = q_{\lambda,i}e^{b_{\lambda,i}x}$$

voor $i = 1, 2$. Het eerste element van $\mathbf{q}_i(x)$ is dus ook periodiek (samen met zijn afgeleide):

$$q_{\lambda,i}(0) = q_{\lambda,i}(a)$$

$$q'_{\lambda,i}(0) = q'_{\lambda,i}(a)$$

Dit bewijst Eq 5, 6, 7 en 8.

Vraag 3

Het subscript λ wordt voor de eenvoud niet langer genoteerd.

We tonen eerst aan dat een niet-triviale oplossing:

$$u(x) = c^1 q_1(x)e^{b_1 x} + c^2 q_2(x)e^{b_2 x} \neq 0$$

tot de voorwaarde in Eq 10 leidt. Opleggen van de randvoorwaarden $u(0) = u(L)$ en $u'(0) = u'(L)$ geeft:

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

Aangezien $q_i(x)$ periodiek is met periode a en $L = Ma$, is $q_i^{(n)}(L) = q_i^{(n)}(0)$ voor $n = 0, 1$. Dit leidt tot:

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

Stel nu dat $c^2 = 0$, dan is de enige manier opdat $c^1 \neq 0$:

$$\begin{cases} q_1(0)[1 - e^{b_1 L}] = 0 \\ [q'_1(0) + b_1 q_1(0)][1 - e^{b_1 L}] = 0 \end{cases}$$

Dus:

$$\begin{cases} [1 - e^{b_1 L}] = 0 & \text{OF} \\ q_1(0) = [q'_1(0) + b_1 q_1(0)] = 0 \end{cases}$$

Analoog voor $c^1 = 0$ vinden we:

$$\begin{cases} [1 - e^{b_2 L}] = 0 & \text{OF} \\ q_2(0) = [q'_2(0) + b_2 q_2(0)] = 0 \end{cases}$$

Indien $[1 - e^{b_1 L}] \neq 0$, is:

$$\det \begin{pmatrix} q_1(0) & q_2(0) \\ q'_1(0) + b_1 q_1(0) & q'_2(0) + b_2 q_2(0) \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 0 & q_2(0) \\ 0 & q'_2(0) + b_2 q_2(0) \end{pmatrix} = 0$$

Analoog voor $c^1 = 0$ en $[1 - e^{b_2 L}] \neq 0$ wordt de tweede kolom nul. Alles samen geeft inderdaad Eq 10. Nu rest enkel nog aan te tonen dat de determinant niet nul kan zijn, want $\{u_1, u_2\}$ is lineair onafhankelijk. De lineaire onafhankelijkheid impliceert dat $c^1 = c^2 = 0$ een unieke oplossing is voor:

$$\begin{cases} u_1 c^1 + u_2 c^2 = 0 \\ u'_1 c^1 + u'_2 c^2 = 0 \end{cases}$$

of in matrixnotatie:

$$\mathbf{Zc} = \mathbf{0}$$

Indien de Wronskiaan $W(x) = \det(Z(x)) \equiv 0$, dan is de nulliteit $\nu(Z) > 0$ en bestaan er dus niet triviale oplossingen $\mathbf{c} \neq \mathbf{0}$. De Wronskiaan in $x = 0$ is precies de determinant in Eq 10:

$$W(0) = \det(Z(0)) = \det \begin{pmatrix} q_1(0) & q_2(0) \\ q'_1(0) + b_1 q_1(0) & q'_2(0) + b_2 q_2(0) \end{pmatrix}$$

Verder weten we, volgens **Proposition 8.15. (Abels formule)**:

$$W(x) = W(0)e^{-\int_0^x \frac{a_1(x)}{a_2(x)} dx} = W(0)$$

met $\sum_{i=0}^2 a_i(x)u^{(i)}(x) = 0$. Indien $W(0) = 0$, dan is $W(x) \equiv 0$ en is dus $\{u_1, u_2\}$ lineair afhankelijk.

Vraag 4

We berekenen eerst de afgeleiden van $u_\kappa(x)$:

$$\begin{cases} u_\kappa(x) = q_\kappa(x)e^{i\kappa x} \\ u'_\kappa(x) = [q'_\kappa(x) + i\kappa q_\kappa(x)]e^{i\kappa x} \\ u''_\kappa(x) = [q''_\kappa(x) + 2i\kappa q'_\kappa(x) - \kappa^2 q_\kappa(x)]e^{i\kappa x} \end{cases}$$

Invullen in Eq 3 en delen door $e^{i\kappa x} \neq 0$, geeft:

$$-q''_\kappa(x) - 2i\kappa q'_\kappa(x) + [V(x) + \kappa^2 - \lambda]q_\kappa = 0$$

met de randvoorwaarden $q_\kappa(0) = q_\kappa(a)$ en $q'_\kappa(0) = q'_\kappa(a)$.

Vraag 5

We herschrijven Eq 15 als:

$$V(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{V}(k) e^{i \frac{2\pi k}{a} x}$$

De Fouriercoëfficiënten $\hat{V}(k)$ komen overeen met:

$$\begin{aligned} \hat{V}(k) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-a/2}^{a/2} V(x) e^{-i \frac{2\pi k}{a} x} dx \\ &= \frac{P_0}{\sqrt{a}} \int_{-a/2}^{a/2} \left[\sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(x - na) \right] e^{-i \frac{2\pi k}{a} x} dx \\ &= \frac{P_0}{\sqrt{a}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left[\int_{-a/2}^{a/2} \delta(x - na) e^{-i \frac{2\pi k}{a} x} dx \right] \\ &= \frac{P_0}{\sqrt{a}} \int_{-a/2}^{a/2} \delta(x) e^{-i \frac{2\pi k}{a} x} dx \\ &= \frac{P_0}{\sqrt{a}} \end{aligned}$$

waarbij we gebruik gemaakt hebben van Tonelli's theorema (met $\delta(x - na) \geq 0$) om de integraal en reeks om te wisselen [1]. De potentiaal $V(x)$ kan dan geschreven worden als:

$$V(x) = \frac{P_0}{a} \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{i \frac{2\pi k}{a} x} = \frac{P_0}{a} \left[1 + 2 \sum_{k \in \mathbb{Z}} \cos(i \frac{2\pi k}{a} x) \right]$$

Dit is dus de limiet van de Dirichlet kernel:

$$V(x) = P_0 \lim_{n \rightarrow \infty} D_n(x)$$

Vraag 6

We berekenen eerst de afgeleiden van $q_{\kappa,n}(x)$:

$$\begin{cases} q_{\kappa,n}(x) = \frac{1}{a^{1/2}} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{q}_{\kappa,n,k} e^{i \frac{2\pi k}{a} x} \\ q'_{\kappa,n}(x) = i \frac{2\pi}{a^{3/2}} \sum_{k \in \mathbb{Z}} k \hat{q}_{\kappa,n,k} e^{i \frac{2\pi k}{a} x} \\ q''_{\kappa,n}(x) = -\frac{4\pi^2}{a^{5/2}} \sum_{k \in \mathbb{Z}} k^2 \hat{q}_{\kappa,n,k} e^{i \frac{2\pi k}{a} x} \end{cases}$$

Invullen in de differentiaalvergelijking voor $q_{\kappa}(x)$ uit vraag 4, en vermenigvuldigen met \sqrt{a} :

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} \left[\left(\frac{4\pi^2}{a^2} \right) k^2 + \left(\frac{4\kappa\pi}{a} \right) k + (V(x) + \kappa^2 - \lambda) \right] \hat{q}_{\kappa,n,k} e^{i \frac{2\pi k}{a} x} = 0$$

Vereenvoudigen en de potentiaal $V(x)$ uit vraag 5 invullen:

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} \left[\lambda - \left(\frac{2\pi k}{a} + \kappa \right)^2 \right] \hat{q}_{\kappa,n,k} e^{i \frac{2\pi k}{a} x} = \sum_{k,k' \in \mathbb{Z}} \left(\frac{P_0}{a} \right) \hat{q}_{\kappa,n,k} e^{i \frac{2\pi(k+k')}{a} x}$$

Voeren we nu voor elke k' de substitutie $k \leftarrow k + k'$ in in het rechterlid:

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} \left[\lambda - \left(\frac{2\pi k}{a} + \kappa \right)^2 \right] \hat{q}_{\kappa,n,k} e^{i \frac{2\pi k}{a} x} = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left[\frac{P_0}{a} \sum_{k' \in \mathbb{Z}} \hat{q}_{\kappa,n,k-k'} \right] e^{i \frac{2\pi k}{a} x}$$

Aangezien $\{\varphi_k(x) = e^{i\frac{2\pi k}{a}x} \mid k \in \mathbb{Z}\}$ een orthonormale basis is voor $L^2([0, a], \mathbb{C})$ (en dus lineair onafhankelijk is), moet elke coëfficiënt bij de Fouriermodes gelijk zijn, m.a.w. er geldt $\forall k \in \mathbb{Z}$:

$$\left[\lambda - \left(\frac{2\pi k}{a} + \kappa \right)^2 \right] \hat{q}_{\kappa, n, k} = \frac{P_0}{a} \sum_{k' \in \mathbb{Z}} \hat{q}_{\kappa, n, k-k'}$$

Ten slotte merken we op dat als k' itereert over \mathbb{Z} , ook $k - k'$ elke waarde in \mathbb{Z} eenmaal bereikt. De uiteindelijke voorwaarde waaraan $\hat{q}_{\kappa, n, k}$ moet voldoen, wordt:

$$\left[\lambda - \left(\frac{2\pi k}{a} + \kappa \right)^2 \right] \hat{q}_{\kappa, n, k} = \frac{P_0}{a} \sum_{k' \in \mathbb{Z}} \hat{q}_{\kappa, n, k'}$$

Vraag 7

Indien $P_0 = 0$, wordt de voorwaarde uit vraag 6:

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

Merk op dat dit $\forall k \in \mathbb{Z}$ moet gelden, voor een bepaalde λ en $\kappa \in [-\pi/a, +\pi/a[$. Dit heeft als gevolg dat er slechts enkele¹ λ bestaan waarvoor niet alle $\hat{q}_{\kappa, n, k} = 0$, die leiden tot niet-triviale oplossingen $u_\lambda \neq 0$. Stel² $\hat{q}_{\kappa, n, k} \neq 0$, dan moet de eerste factor gelijk zijn aan 0. Dit leidt tot een eigenwaarde:

$$\lambda_{\kappa, k} = \left(\frac{2\pi k}{a} + \kappa \right)^2$$

De eigenfunctie $u_{\lambda_{\kappa, k}}(x)$ wordt gegeven door:

$$u_{\lambda_{\kappa, k}}(x) = q_{\kappa, k}(x) e^{i\kappa x} = \frac{\hat{q}_{\kappa, n, k}}{\sqrt{a}} e^{i(\frac{2\pi k}{a} + \kappa)x} = \mathcal{N} e^{i(\frac{2\pi k}{a} + \kappa)x}$$

waarbij $\mathcal{N} = \hat{q}_{\kappa, n, k}/\sqrt{a} \in \mathbb{C}$ een willekeurige³ constante is.

We onderzoeken nu hoe de kleinste eigenwaarde $\lambda_{n=1}(\kappa)$ varieert als functie van κ . We moeten dus eerst $k \in \mathbb{Z}$ vinden waarvoor $\lambda_{n=1}([-\pi/a, +\pi/a[)$ minimaal is (m.a.w. $\forall \lambda_1 \in \lambda_{n=1}([-\pi/a, +\pi/a[), \lambda_n \in \lambda_{n \neq 1}([-\pi/a, +\pi/a[) : \lambda_1 < \lambda_n$, aangezien energiebanden niet overlappen⁴). Het is eenvoudig om in te zien dat dit gebeurt bij $k = 0$, zodat:

$$\lambda_{n=1}(\kappa) = \lambda_{\kappa, k=0} = \kappa^2$$

De energieband komt dus overeen met $\{E\}_1 = \lambda_{n=1}([-\pi/a, +\pi/a[) = [0, \pi^2/a^2[$ en heeft de volgende eigenschappen:

$$\begin{aligned} \min\{E\}_1 &= 0 \\ \sup\{E\}_1 &= \frac{\pi^2}{a^2} \end{aligned}$$

Het heeft dus een bandbreedte $\Delta E_1 = \sup\{E\}_1 - \min\{E\}_1 = \pi^2/a^2$.

¹Relatief gezien. Er bestaat nog steeds een oneindig aantal λ .

²Voor dus 1 bepaalde $k \in \mathbb{Z}$. Dit leidt tot een eigenwaarde $\lambda_{\kappa, k}$, zodat $\hat{q}_{\kappa, n, k'} = 0$ als $k' \neq k$.

³In de kwantummechanica kan $u_{\lambda_{\kappa, k}}(x)$ de golf functie van een vrij deeltje voorstellen, met energie $\lambda_{\kappa, k} = (2\pi k/a + \kappa)^2$ (in eenheden waarbij $\hbar^2/2m = 1$). In dat geval is er een bijkomende voorwaarde dat $\langle u_\lambda | u_\lambda \rangle = 1$, zodat \mathcal{N} de rol speelt van een normalisatieconstante.

⁴Zie **Appendix**.

Vraag 8

Het is eerst en vooral eenvoudig in te zien dat $C = \sqrt{a}q(0)$, aangezien:

$$q(0) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{k' \in \mathbb{Z}} \hat{q}_{k'} = \frac{C}{\sqrt{a}}$$

Uit vraag 6 weten we dat de voorwaarde waaraan \hat{q}_k moet voldoen, gegeven wordt door:

$$\left[\lambda - \left(\frac{2\pi k}{a} + \kappa \right)^2 \right] \hat{q}_k = \frac{P_0 C}{a}$$

Omvormen naar \hat{q}_k geeft inderdaad het gezochte verband:

$$\hat{q}_k = \frac{P_0 C}{a f(k, \kappa, \lambda)}$$

waarbij $f(k, \kappa, \lambda)$ gegeven wordt door:

$$f(k, \kappa, \lambda) = \lambda - \left(\frac{2\pi k}{a} + \kappa \right)^2$$

Vraag 9

We bereken de Fouriercoëfficiënten als volgt:

$$\hat{q}_k = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_0^a q(x) e^{-i \frac{2\pi k}{a} x} dx$$

waarbij $q(x)$ gegeven wordt door Eq 20. Om de berekeningen iets eenvoudiger te maken, vermenigvuldigen we heel de vergelijking met een constante. Uitwerking van de integraal:

$$\begin{aligned} i \left(\frac{2pa}{P_0 C} \right) \hat{q}_k &= \int_0^a \left[\frac{e^{-i(p+\kappa)x}}{e^{-i(p+\kappa)a} - 1} \right] e^{-i \frac{2\pi k}{a} x} dx + \int_0^a \left[\frac{e^{i(p-\kappa)x}}{e^{i(p-\kappa)a} - 1} \right] e^{-i \frac{2\pi k}{a} x} dx \\ &= \frac{1}{e^{-i(p+\kappa)a} - 1} \int_0^a e^{-i(p+\kappa + \frac{2\pi k}{a})x} dx - \frac{1}{e^{i(p-\kappa)a} - 1} \int_0^a e^{i(p-\kappa - \frac{2\pi k}{a})x} dx \\ &= \frac{i}{e^{-i(p+\kappa)a} - 1} \left[\frac{e^{-i(p+\kappa + \frac{2\pi k}{a})x}}{p + (\kappa + \frac{2\pi k}{a})} \right]_{x=0}^a + \frac{i}{e^{i(p-\kappa)a} - 1} \left[\frac{e^{i(p-\kappa - \frac{2\pi k}{a})x}}{p - (\kappa + \frac{2\pi k}{a})} \right]_{x=0}^a \\ &= \frac{i}{p + (\kappa + \frac{2\pi k}{a})} + \frac{i}{p - (\kappa + \frac{2\pi k}{a})} \\ &= i \left[\frac{2p}{p^2 - (\kappa + \frac{2\pi k}{a})^2} \right] \end{aligned}$$

Aangezien $p^2 = \lambda$, vinden we inderdaad:

$$\hat{q}_k = \frac{P_0 C}{a [\lambda - (\kappa + \frac{2\pi k}{a})^2]} = \frac{P_0 C}{a f(k, \kappa, \lambda)}$$

Hiermee hebben we bewezen dat Eq 20 leidt tot de Fouriercoëfficiënten in Eq 17.

Stellen we nu $C = \sqrt{a}q(0)$ in Eq 20, dan vinden we:

$$q(x) = \frac{-iP_0}{2p} \left[\frac{e^{-i(p+\kappa)x}}{e^{-i(p+\kappa)a} - 1} - \frac{e^{i(p-\kappa)x}}{e^{i(p-\kappa)a} - 1} \right] q(0)$$

Evalueren in $x = 0$:

$$q(0) = \frac{-iP_0}{2p} \left[\frac{1}{e^{-i(p+\kappa)a} - 1} - \frac{1}{e^{i(p-\kappa)a} - 1} \right] q(0)$$

Aangezien $q(0) \neq 0$ (dit zou overeenkomen met de triviale oplossing $q(x) \equiv 0$), vinden we een verband tussen $p = \sqrt{\lambda}$ en κ :

$$i \frac{2p}{P_0} = \frac{1}{e^{-i(p+\kappa)a} - 1} - \frac{1}{e^{i(p-\kappa)a} - 1} = \frac{e^{i(p-\kappa)a} - e^{-i(p+\kappa)a}}{e^{-i(2\kappa)a} - e^{-i(p+\kappa)a} - e^{i(p-\kappa)a} + 1}$$

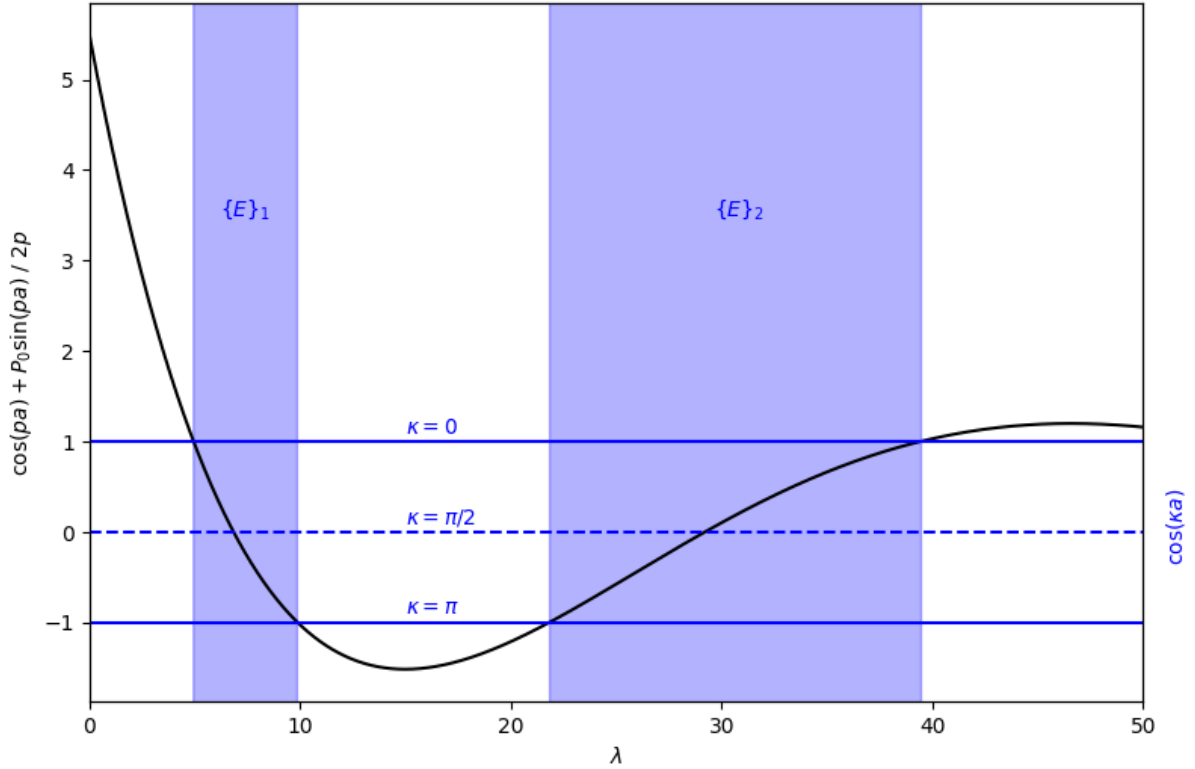
Nu vermenigvuldigen we teller en noemer met $e^{i\kappa a}$ en maken we gebruik van de welbekende identiteit $e^{it} = \cos(t) + i \sin(t)$:

$$i \frac{2p}{P_0} = \frac{e^{ipa} - e^{-ipa}}{(e^{i\kappa a} + e^{-i\kappa a}) - (e^{ipa} + e^{-ipa})} = \frac{i \sin(pa)}{\cos(\kappa a) - \cos(pa)}$$

zodat we inderdaad Eq 23 vinden:

$$\cos(\kappa a) = \cos(pa) + \frac{P_0}{2p} \sin(pa)$$

In Figuur 1 is het rechterlid (zwart) van deze vergelijking voorgesteld, als functie van $\lambda = p^2$. De horizontale lijnen (blauw) komen overeen met het linkerlid, voor $\kappa = 0, \pi/2, \pi$. Er zijn slechts bepaalde waarden van λ die een aanleiding geven tot oplossingen⁵. Deze gebieden zijn in het blauw gemarkeerd en komen overeen met de verschillende energiebanden $\{E\}_n$. De code voor Figuur 1 is terug te vinden in de **Appendix**.



Figuur 1: Grafische voorstelling van Eq 23 voor $a = 1$ en $P_0 = 9$. Het rechterlid is in het zwart getekend, als functie van $\lambda = p^2$. Enkel waarden van λ waarvoor het rechterlid tussen -1 en 1 ligt geven aanleiding tot oplossingen voor κ , waardoor energiebanden $\{E\}_n$ ontstaan.

⁵Deze zijn opnieuw ontaard (behalve $\kappa = 0$), aangezien $\pm\kappa$ dan overeenkomen met dezelfde energie $\lambda_{\kappa,n}$

Appendix

1 Energiebanden

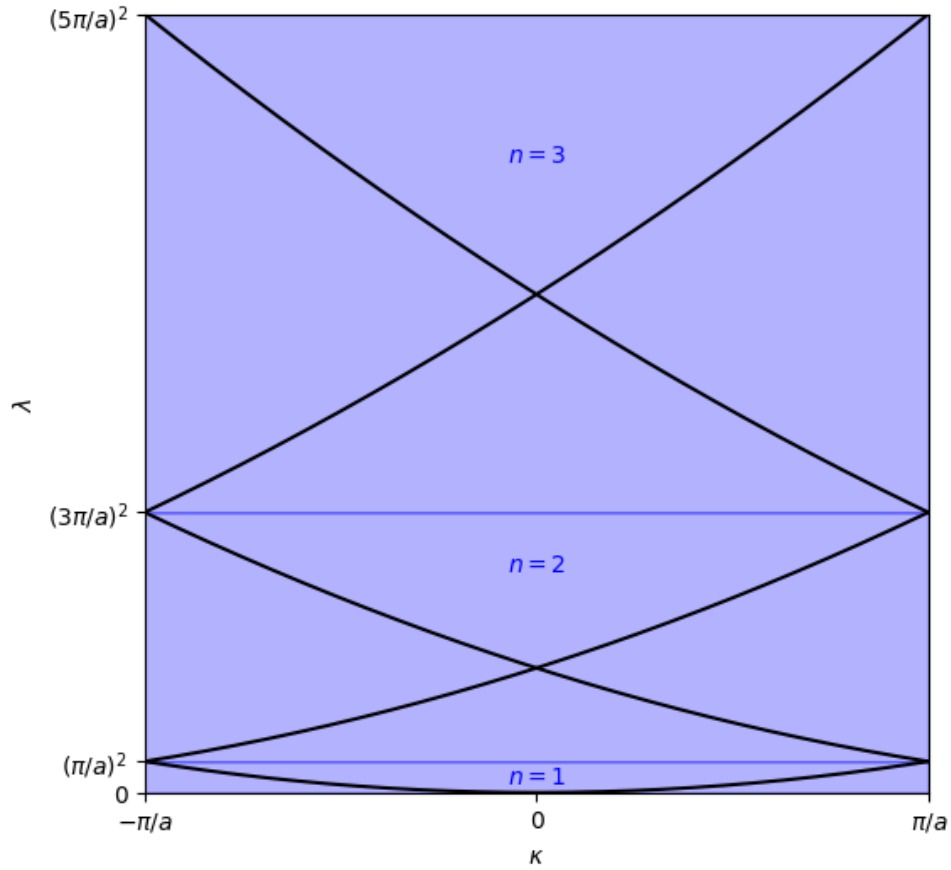
We beschouwen eerst het geval waarbij $P_0 = 0$. In dat geval worden de eigenwaarden $\lambda_{\kappa,k}$ gegeven door:

$$\lambda_{\kappa,k} = \left(\frac{2\pi k}{a} + \kappa \right)^2$$

waarbij $k \in \mathbb{Z}$ en $\kappa \in [-\pi/a, \pi/a[$. De bijbehorende eigenfuncties zijn:

$$u_{\kappa,k}(x) = q_{\kappa,k}(x)e^{i\kappa x} = \mathcal{N}e^{i(\frac{2\pi k}{a} + \kappa)x}$$

met $\mathcal{N} \in \mathbb{C}$. Merk eerst en vooral op dat er verschillende eigenfuncties $u_{\kappa,k}$ zijn met dezelfde energie $\lambda_{\kappa,k}$. Om dit in te zien, is in Figuur 2 $\lambda_{\kappa,k}$ als functie van κ weergegeven, voor $k = 0, \pm 1, \pm 2$.



Figuur 2: $\lambda_{\kappa,k}$ als functie van κ , voor $k = 0, \pm 1, \pm 2$. De verschillende energiebanden $n = |k| + 1$ zijn in het blauw gemarkeerd.

We zien dat elke energie $\lambda \geq 0$ bereikt wordt. Meer nog, elke energie $\lambda > 0$ is ontwaard, waarbij (κ, k) aanleiding geven tot dezelfde energie $\lambda_{\kappa,k}$ als $(-\kappa, -k)$. Er zijn dus 2 verschillende eigenfuncties $u_{\kappa,k}$ met dezelfde eigenwaarde.

Als we nu $\lambda_k(\kappa) = \lambda_{\kappa,k}$ beschouwen als functie van κ , dan zien we dat er voor verschillende k energiebanden $\{E\}_n = \lambda_{\pm k}([-\pi/a, \pi/a[)$ ontstaan, waarbij $n = |k| + 1$ (aangezien het beeld voor $\pm k$ gelijk is). Deze energiebanden overlappen bovendien niet (dit is eenvoudig in te zien door te kijken naar de minima en maxima van verschillende banden). De bandbreedte van de eerste band is:

$$\Delta E_1 = \frac{\pi^2}{a^2}$$

Voor elke andere band $n > 1$ geldt:

$$\Delta E_n = \frac{(2n-1)^2\pi^2}{a^2} - \frac{(2n-3)^2\pi^2}{a^2} = \frac{8(n-1)\pi^2}{a^2}$$

Het geval $P_0 = 0$ komt overeen met het kwantummechanisch vrij deeltje, waarbij $\hat{L} = -\hat{D}^2$ overeenkomt met de *Hamiltoniaan* (in eenheden waarbij $\hbar^2/2m = 1$). In dat geval zijn de energie-eigenwaarden:

$$E_K = K^2$$

en de (ongegenormaliseerde) eigenfuncties:

$$\phi_K(x) = \mathcal{N}e^{iKx}$$

met $\mathcal{N} \in \mathbb{C}$. Dit is dus volledig analoog aan wat we vonden. Opnieuw is elke energie $E > 0$ ontwaard, corresponderend met een impuls $\pm\hbar K$. Ook het energiespectrum $\{E\} = [0, \infty[$ komt overeen met wat we vonden (waarbij het spectrum dan niet meer opgedeeld is in banden).

Wanneer nu de potentiaal aanzetten, zodat $P_0 > 0$, moeten de eigenwaarden $\lambda_n(\kappa) = p_n^2(\kappa)$ voldoen aan:

$$\cos(\kappa a) = \cos(p_n a) + \frac{P_0}{2p_n} \sin(p_n a)$$

De eigenfuncties $u_{\kappa,n}(x)$ worden gegeven door:

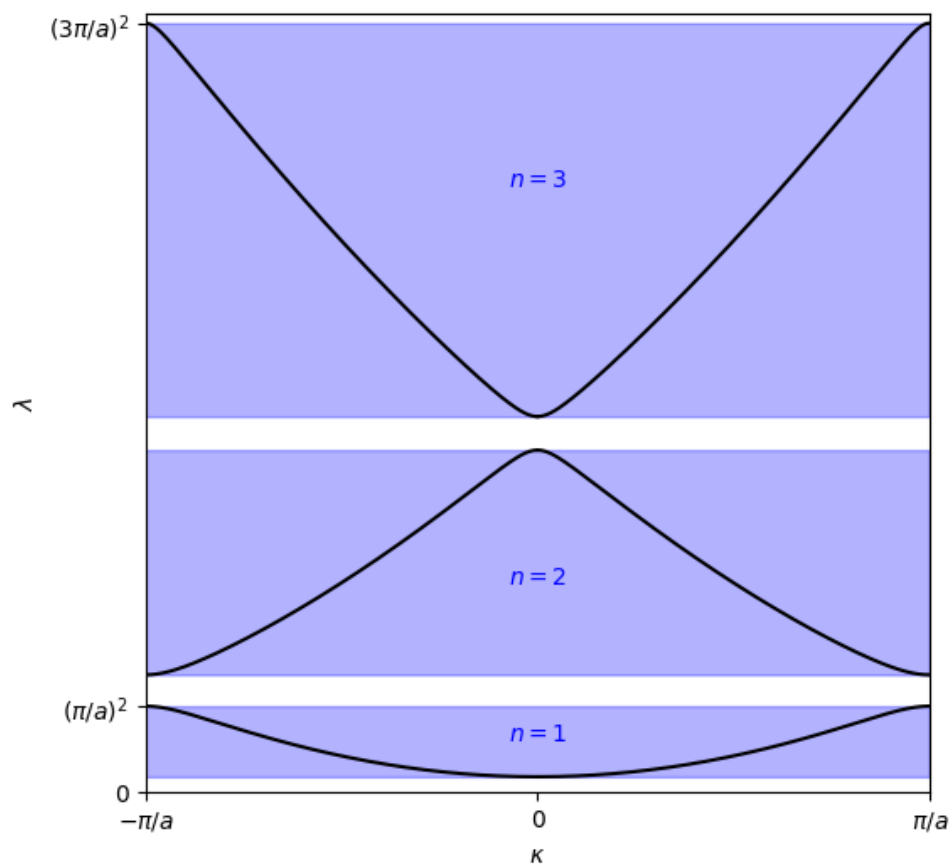
$$u_{\kappa,n}(x) = q_{\kappa,n}(x)e^{i\kappa x} = \frac{-iP_0}{2p_n} \left[\frac{e^{-ip_n x}}{e^{-i(p_n+\kappa)a} - 1} - \frac{e^{ip_n x}}{e^{i(p_n-\kappa)a} - 1} \right] q_{\kappa,n}(0)$$

Opnieuw zijn er verschillende eigenfuncties $u_{\kappa,n}$ met dezelfde energie $\lambda_n(\kappa)$, namelijk voor $\pm\kappa$. In Figuur 3 is $\lambda_n(\kappa)$ als functie van κ weergegeven, voor $P_0 = 2$ en $n = 1, 2, 3$.

De structuur van de energiebanden is heel gelijkaardig aan die bij $P_0 = 0$. Er gebeurt echter iets heel eigenaardigs: de energiebanden met $n > 1$ splitsen in twee. Zo zien we dat de band $n = 2$ voor $P_0 = 0$ en *gap* krijgt en splitst in de banden $n = 2$ en $n = 3$. Bovendien krijgen de banden bij $P_0 = 0$ nu ook gaps tussen elkaar.

We kunnen dit opnieuw kwantummechanisch bekijken als een deeltje in een periodieke potentiaal $V(x) = P_0 \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(x - na)$. Dit kan bijvoorbeeld een elektron in een ééndimensionaal kristal zijn, waarbij er een sterk afstotende kracht is op de punten $x = na$. Volledig analoog aan hierboven, stelt $\lambda_n(\kappa)$ weer de energie van het deeltje voor.

We kunnen $V(x)$ nu ook beschouwen als een opeenvolging van *wells* (putten) met breedte a . In dat geval stelt Figuur 3 de mogelijke energiewaarden van het deeltje in gebonden toestand voor. Als P_0 groter wordt, dan wordt het deeltje steeds sterker gebonden en zullen de energiebanden dunner en dunner worden.



Figuur 3: $\lambda_n(\kappa)$ als functie van κ , voor $P_0 = 2$ en $n = 1, 2, 3$. De verschillende energiebanden n zijn in het blauw gemarkeerd.

2 Code

De figuren werden gemaakt in *Python* met behulp van de *matplotlib package*. Hieronder is de code terug te vinden voor Figuur 1.

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

a = 1
V0 = 9
L = np.arange(0, 50.001, 0.001)

def f(L):
    F = np.full(np.shape(L), np.nan)

    P = np.sqrt(L)
    zero_idx = (P == 0)

    F[~zero_idx] = (
        np.cos(P[~zero_idx] * a) +
        (V0 / (2 * P[~zero_idx])) * np.sin(P[~zero_idx] * a)
    )

    return F

F = f(L)
allowed_idx = (F <= 1)
allowed_idx[F < -1] = False

fig, ax1 = plt.subplots(figsize=(9, 6))
ax2 = ax1.twinx()

ax1.plot(L, F, color='k')

ax1.axhline(-1, color='blue')
ax1.axhline(0, color='blue', linestyle='dashed')
ax1.axhline(1, color='blue')
ax1.fill_between(
    L, -1, 1, where=allowed_idx,
    color='blue', alpha=0.3, transform=ax1.get_xaxis_transform()
)

ax1.set_xlim(L[0], L[-1])
ax1.set_xlabel(r'$\lambda$')
ax1.set_ylabel(r'$\cos(pa) + P_0 \sin(pa) / 2p$')

ax2.set_yticks([])
ax2.set_ylabel(r'$\cos(\kappa a)$', color='blue')
ax2.yaxis.set_label_coords(1.02, 0.25)
```

```

ax1.annotate(
    r'$\kappa = 0$', (15, 1), (0, 4),
    xycoords='data', textcoords='offset points',
    color='blue'
)
ax1.annotate(
    r'$\kappa = \pi/2$', (15, 0), (0, 4),
    xycoords='data', textcoords='offset points',
    color='blue'
)
ax1.annotate(
    r'$\kappa = \pi$', (15, -1), (0, 4),
    xycoords='data', textcoords='offset points',
    color='blue'
)

ax1.annotate(r'$\{E\}_1$', (6.2, 3.5), color='blue')
ax1.annotate(r'$\{E\}_2$', (29.6, 3.5), color='blue')

plt.show()

```

Dit is de code voor Figuur 2.

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

a = 1
KAPPA = np.arange(-np.pi / a, np.pi / a, 0.001)

def e(kappa, k):
    return (2 * np.pi * k / a + kappa)**2

EE = [e(KAPPA, k) for k in [0, -1, 1, -2, 2]]

fig, ax = plt.subplots(figsize=(6, 6))

for E in EE:
    ax.plot(KAPPA, E, color='k')

ax.fill_between(KAPPA, 0, (np.pi/a)**2, color='blue', alpha=0.3)
ax.fill_between(KAPPA, (np.pi/a)**2, (3*np.pi/a)**2, color='blue', alpha=0.3)
ax.fill_between(KAPPA, (3*np.pi/a)**2, (5*np.pi/a)**2, color='blue', alpha=0.3)

ax.set_xlim(-np.pi/a, np.pi/a)
ax.set_ylim(0, (5 * np.pi / a)**2)
ax.set_xlabel(r'$\kappa$')
ax.set_ylabel(r'$\lambda$')
ax.set_xticks([-np.pi / a, 0, np.pi / a])
ax.set_xticklabels([r'$-\pi/a$', r'$0$', r'$\pi/a$'])
ax.set_yticks([0, (np.pi/a)**2, (3*np.pi/a)**2, (5*np.pi/a)**2])
ax.set_yticklabels([
    r'$0$',
    r'$\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$',
    r'$\left(\frac{3\pi}{a}\right)^2$',
    r'$\left(\frac{5\pi}{a}\right)^2$'
])

ax.annotate(r'$n = 1$', (-0.23, 3), color='blue')
ax.annotate(r'$n = 2$', (-0.23, 70), color='blue')
ax.annotate(r'$n = 3$', (-0.23, 200), color='blue')

plt.show()
```


En uiteindelijk ook de code voor Figuur 3.

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

a = 1
V0 = 2
L = np.arange(0.001, 90.0001, 0.0001)

def k(L):
    P = np.sqrt(L)
    F = np.cos(P * a) + (V0 / (2 * P)) * np.sin(P * a)
    F[F > 1] = np.nan
    F[F < -1] = np.nan
    return np.arccos(F) / a

K = k(L)

L_allowed = L[~np.isnan(K)]
jumps_idx = np.diff(L_allowed) > 0.001

L_old = np.append(L_allowed[0], L_allowed[1:][jumps_idx])
L_new = np.append(L_allowed[:-1][jumps_idx], L_allowed[-1])

fig, ax = plt.subplots(figsize=(6, 6))

ax.plot(K, L, color='k')
ax.plot(-K, L, color='k')

for l_old, l_new in zip(L_old, L_new):
    ax.fill_between(
        np.arange(-np.pi/a, np.pi/a, 0.001), l_old, l_new,
        color='blue', alpha=0.3
    )

ax.set_xlim(-np.pi/a, np.pi/a)
ax.set_ylim(0, 90)
ax.set_xticks([-np.pi/a, 0, np.pi/a])
ax.set_xticklabels([r'$-\pi/a$', r'$0$', r'$\pi/a$'])
ax.set_yticks([0, (np.pi/a)**2, (3*np.pi/a)**2])
ax.set_yticklabels([
    r'$0$',
    r'$\left( \pi/a \right)^2$',
    r'$\left( 3\pi/a \right)^2$',
])

ax.set_xlabel(r'$\kappa$')
ax.set_ylabel(r'$\lambda$')

ax.annotate(r'$n = 1$', (-0.23, 6), color='blue')
ax.annotate(r'$n = 2$', (-0.23, 24), color='blue')
ax.annotate(r'$n = 3$', (-0.23, 70), color='blue')

plt.show()
```

Bronvermelding

- [1] Wikipedia contributors. *Fubini's theorem* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. [Online; geraadpleegd op 17 december 2023]. 2023. URL: https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Fubini%27s_theorem&oldid=1188925513.