Hochschule RheinMain SS 2023
Prof. Dr. D. Lehmann

Lösungen 2. Übungsblatt
Mathematische Methoden in der Quantenmechanik

Aufgabe 1: Zunächst mal können wir schreiben

$$A \;=\; a\,Id + B$$

mit der Matrix

$$B \;=\; \begin{pmatrix} 0 & b & 0 & \cdots & 0 \\ c & 0 & b & \ddots & \vdots \\ 0 & c & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & b \\ 0 & \cdots & 0 & c & 0 \end{pmatrix} \;\in\; \mathbb{C}^{N\times N}$$

Die Gleichung

$$A\vec{v} \;=\; \lambda\,\vec{v}$$

ist also äquivalent zu

$$B\vec{v} \;=\; (\lambda - a)\,\vec{v} \;=:\; \mu\,\vec{v}$$

und wir müssen zeigen, dass die angegebenen Vektoren $\vec{v}_n$ Eigenvektoren von B zu den Eigenwerten

$$\mu_n \;=\; \lambda_n - a \;=\; 2\sqrt{bc}\,\cos\tfrac{n\pi}{N+1}$$

sind. Das tun wir jetzt einfach nachrechnen: Für eine innere Komponente v_j mit $2 \le j \le N-1$ bekommen wir

$$\begin{aligned}(B\vec{v}_n)_j \;&=\; b\,v_{n,j+1} + c\,v_{n,j-1} \\ &=\; b\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{j+1}{2}} \sin\tfrac{\pi(j+1)n}{N+1} \;+\; c\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{j-1}{2}} \sin\tfrac{\pi(j-1)n}{N+1} \\ &=\; \sqrt{bc}\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{j}{2}} \left[\sin\tfrac{\pi(j+1)n}{N+1} \;+\; \sin\tfrac{\pi(j-1)n}{N+1}\right]\end{aligned}$$

Mit dem Additionstheorem

$$\sin\alpha + \sin\beta \;=\; 2\,\sin\tfrac{\alpha+\beta}{2}\,\cos\tfrac{\alpha-\beta}{2}$$

wird die eckige Klammer zu

$$\sin\tfrac{\pi(j+1)n}{N+1} \;+\; \sin\tfrac{\pi(j-1)n}{N+1} \quad=\quad 2\,\sin\tfrac{\pi jn}{N+1}\,\cos\tfrac{\pi n}{N+1}$$

Also erhalten wir

$$\begin{aligned}
(B\vec{v}_n)_j &= \sqrt{bc}\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{j}{2}}\left[\sin\tfrac{\pi(j+1)n}{N+1} \;+\; \sin\tfrac{\pi(j-1)n}{N+1}\right] \\
&= \sqrt{bc}\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{j}{2}} 2\,\sin\tfrac{\pi jn}{N+1}\,\cos\tfrac{\pi n}{N+1} \\
&= 2\sqrt{bc}\,\cos\tfrac{\pi n}{N+1}\,\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{j}{2}}\sin\tfrac{\pi jn}{N+1} \quad=\quad (\lambda_n - a)\,v_{n,j}
\end{aligned}$$

Wir müssen noch überprüfen, dass das auch für die Randpunkte $j = 1$ und $j = N$ richtig ist. Wir bekommen

$$\begin{aligned}
(B\vec{v}_n)_1 &= b\,v_{n,1+1} \;+\; 0 \\
&= b\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{1+1}{2}}\,\sin\tfrac{\pi(1+1)n}{N+1} \;+\; 0 \\
&= \sqrt{bc}\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{1}{2}} 2\,\sin\tfrac{\pi\cdot 1\cdot n}{N+1}\,\cos\tfrac{\pi\cdot 1\cdot n}{N+1}
\end{aligned}$$

wobei wir die Formel $\sin 2\alpha = 2\sin\alpha\cos\alpha$ benutzt haben. Also,

$$(B\vec{v}_n)_1 \quad=\quad 2\sqrt{bc}\,\cos\tfrac{\pi n}{N+1}\,\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\tfrac{\pi\cdot 1\cdot n}{N+1} \quad=\quad (\lambda_n - a)\,v_{n,1}$$

das stimmt auch. Schliesslich,

$$\begin{aligned}
(B\vec{v}_n)_N &= 0 \;+\; c\,v_{n,N-1} \\
&= 0 \;+\; c\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{N-1}{2}}\,\sin\tfrac{\pi(N-1)n}{N+1} \\
&= \sqrt{bc}\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{N}{2}}\left[\,\sin\tfrac{\pi(N-1)n}{N+1} \;+\; \underbrace{\sin\tfrac{\pi(N+1)n}{N+1}}_{=\,0}\,\right] \\
&= \sqrt{bc}\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{N}{2}} 2\,\sin\tfrac{\pi Nn}{N+1}\,\cos\tfrac{\pi n}{N+1} \\
&= 2\sqrt{bc}\,\cos\tfrac{\pi n}{N+1}\,\left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{N}{2}}\sin\tfrac{\pi Nn}{N+1} \quad=\quad (\lambda_n - a)\,v_{n,N}
\end{aligned}$$

und damit ist alles gezeigt.

Aufgabe 2: a) Wir haben die Parameterwerte

$$\begin{aligned}
a &= 0 \\
b &= +1 \\
c &= -1
\end{aligned}$$

und

$$N \;\to\; 2N+1$$

Also, wenn wir jetzt noch den Vorfaktor von $1/(2\Delta x)$ mit berücksichtigen,

$$\lambda_n \;=\; \tfrac{1}{2\Delta x}\left(a \;+\; 2\sqrt{bc}\,\cos\tfrac{n\pi}{2N+2}\right) \;=\; \tfrac{1}{2\Delta x}\,2\sqrt{-1}\,\cos\tfrac{n\pi}{2N+2} \;=\; \tfrac{i}{\Delta x}\,\cos\tfrac{n\pi}{2N+2}$$

mit

$$n \;\in\; \{1, 2, \cdots, 2N+1\}$$

b) Die Eigenwerte von D_{pc}, von der symmetrischen diskretisierten Ableitung mit periodischen Randbedingungen, waren

$$\lambda_{k_j} \;=\; i\,\tfrac{\sin(k_j\Delta x)}{\Delta x}$$

mit den Impulsen

$$k_j \;=\; \tfrac{2\pi\,j}{2L+\Delta x} \;=\; \tfrac{2\pi\,j}{2L+1/M} \;=\; \tfrac{2\pi M\,j}{2N+1}$$

und

$$j \;\in\; \{-N, -N+1, \cdots, -1, 0, +1, \cdots, +N-1, +N\}$$

Die Werte für $k_j\Delta x = k_j/M$ sind dann also gegeben durch

$$k_j\Delta x \;=\; \tfrac{2\pi\,j}{2N+1} \;\in\; \Big\{-\pi\,\tfrac{N}{N+\frac{1}{2}}\,, \cdots,\; +\pi\,\tfrac{N}{N+\frac{1}{2}}\Big\} \;\subset\; \big(-\pi\,,\, +\pi\big)$$

Also,

$$\lambda_{k_j} \;\equiv\; \lambda_j^{pc} \;=\; \tfrac{i}{\Delta x}\,\sin(k_j\Delta x) \;=\; \tfrac{i}{\Delta x}\,\sin\!\big(\tfrac{2\pi\,j}{2N+1}\big)\,, \qquad j = -N, \cdots, +N \tag{1}$$

Das wollen wir vergleichen mit den Eigenwerten der symmetrischen diskreten Ableitung mit Dirichlet-Randbedingungen D_{dc}, gegeben durch

$$\lambda_n \;=\; \lambda_n^{dc} \;=\; \tfrac{i}{\Delta x}\,\cos\tfrac{n\pi}{2N+2}\;, \qquad n \;=\; 1, 2, \cdots, 2N+1 \tag{2}$$

Die λ_n^{dc} bilden eine streng monoton fallende Folge, lassen wir die mal so stehen. Wenn wir den Vorfaktor $i/\Delta x$ weglassen, gehen die λ_n^{dc} im wesentlichen von $\cos 0 = +1$ nach $\cos\pi = -1$. Die λ_j^{pc} gehen im wesentlichen von $\sin(-\pi) = 0$ über $\sin(-\pi/2) = -1$, $\sin(0) = 0$ und $\sin(+\pi/2) = +1$ nach $\sin(+\pi) = 0$, allerdings mit der doppelten Schrittweite. Der Wertebereich, im wesentlichen $[-1, +1]$, wird also zweimal durchlaufen, aber mit doppelter Schrittweite. Versuchen wir, die λ_j^{pc} den entsprechenden λ_n^{dc} zuzuordnen:

Nehmen wir an, dass N gerade ist so dass $N/2$ ganzzahlig ist. Für $j = -N/2, \cdots, +N/2$, also für $|j| \leq N/2$, benutzen wir $\sin(x) = \cos(\pi/2 - x)$ und schreiben

$$\sin\!\big(\tfrac{2\pi\,j}{2N+1}\big) \;=\; \cos\!\big(\tfrac{\pi}{2} - \tfrac{2\pi\,j}{2N+1}\big) \;=\; \cos\!\big(\tfrac{2\pi N+\pi-4\pi\,j}{2(2N+1)}\big) \;=\; \cos\!\big(\pi\,\tfrac{N-2j+\frac{1}{2}}{2N+1}\big)$$

Für diese $|j| \leq N/2$ substituieren wir

$$n \;:=\; N - 2j + 1 \;\;\in\; \{1, 3, 5, \cdots, 2N+1\} \tag{3}$$

und bekommen

$$\begin{aligned} \lambda_j^{pc} \;&=\; \tfrac{i}{\Delta x}\, \sin\!\big(\tfrac{2\pi j}{2N+1}\big) \;=\; \tfrac{i}{\Delta x}\, \cos\!\big(\pi\, \tfrac{N-2j+\frac{1}{2}}{2N+1}\big) \\ &=\; \tfrac{i}{\Delta x}\, \cos\!\big(\pi\, \tfrac{n-\frac{1}{2}}{2N+1}\big) \;\approx\; \tfrac{i}{\Delta x}\, \cos\!\big(\pi\, \tfrac{n}{2N+2}\big) \;=\; \lambda_n^{dc} \;, \qquad n \;=\; N - 2j + 1 \end{aligned} \tag{4}$$

Matchen wir vielleicht noch die Eigenwerte λ_j^{pc} mit Index $j = N/2+1, \cdots, N/2+N/2 = N$. Wir benutzen $\sin(x) = \cos(\pi/2 - x) = \cos(x - \pi/2)$ und schreiben

$$\sin\!\big(\tfrac{2\pi j}{2N+1}\big) \;=\; \cos\!\big(\tfrac{2\pi j}{2N+1} - \tfrac{\pi}{2}\big) \;=\; \cos\!\big(\tfrac{4\pi j - 2\pi N - \pi}{2(2N+1)}\big) \;=\; \cos\!\big(\pi\, \tfrac{2j-N-\frac{1}{2}}{2N+1}\big)$$

Für diese $j > N/2$ substituieren wir dann

$$n \;:=\; 2j - N \;\;\in\; \{2, 4, \cdots, N\} \tag{5}$$

und bekommen

$$\begin{aligned} \lambda_j^{pc} \;&=\; \tfrac{i}{\Delta x}\, \sin\!\big(\tfrac{2\pi j}{2N+1}\big) \;=\; \tfrac{i}{\Delta x}\, \cos\!\big(\pi\, \tfrac{2j-N-\frac{1}{2}}{2N+1}\big) \\ &=\; \tfrac{i}{\Delta x}\, \cos\!\big(\pi\, \tfrac{n-\frac{1}{2}}{2N+1}\big) \;\approx\; \tfrac{i}{\Delta x}\, \cos\!\big(\pi\, \tfrac{n}{2N+2}\big) \;=\; \lambda_n^{dc} \;, \qquad n \;=\; 2j - N \end{aligned} \tag{6}$$

Okay, jetzt haben wir die Logik rausgefunden, dann machen wir die letzten auch noch. Für $j < -N/2$ benutzen wir $\sin(x) = \cos(x + 3\pi/2)$ und schreiben

$$\sin\!\big(\tfrac{2\pi j}{2N+1}\big) \;=\; \cos\!\big(\tfrac{2\pi j}{2N+1} + \tfrac{3\pi}{2}\big) \;=\; \cos\!\big(\tfrac{4\pi j + 6\pi N + 3\pi}{2(2N+1)}\big) \;=\; \cos\!\big(\pi\, \tfrac{2j+3N+\frac{3}{2}}{2N+1}\big)$$

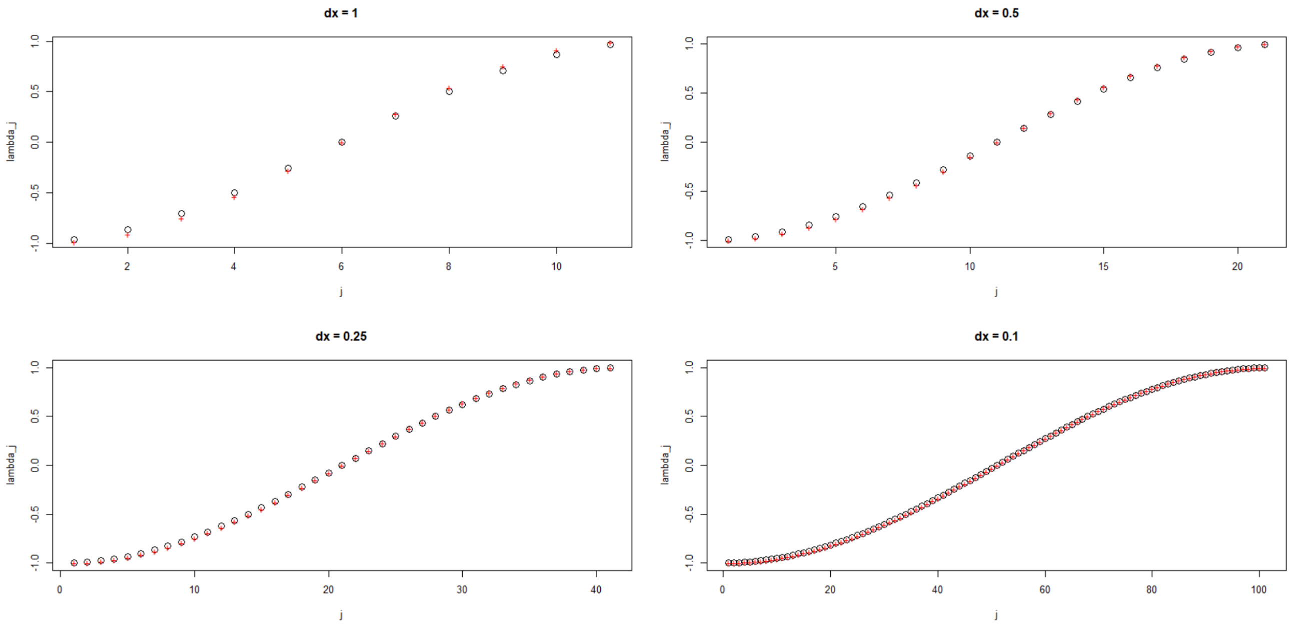
Für diese $j < -N/2$ substituieren wir dann

$$n \;:=\; 2j + 3N + 2 \;\;\in\; \{N+2, N+4, \cdots, 2N\} \tag{7}$$

und bekommen

$$\begin{aligned} \lambda_j^{pc} \;&=\; \tfrac{i}{\Delta x}\, \sin\!\big(\tfrac{2\pi j}{2N+1}\big) \;=\; \cos\!\big(\pi\, \tfrac{2j+3N+2-\frac{1}{2}}{2N+1}\big) \\ &=\; \tfrac{i}{\Delta x}\, \cos\!\big(\pi\, \tfrac{n-\frac{1}{2}}{2N+1}\big) \;\approx\; \tfrac{i}{\Delta x}\, \cos\!\big(\pi\, \tfrac{n}{2N+2}\big) \;=\; \lambda_n^{dc} \;, \qquad n \;=\; 2j + 3N + 2 \end{aligned} \tag{8}$$

Ordnen wir die λ_j^{pc} dann der Grösse nach, die λ_j^{dc} sind ja schon der Grösse nach geordnet (ok, von gross nach klein, wir plotten gleich von klein nach gross), bekommt man etwa die folgenden Bilder, die roten Kreuze sind die λ_j^{pc} und die schwarzen Kreise sind die λ_j^{dc}:



c) Mit Aufgabe 1 bekommen wir die Eigenvektoren $\vec{v}_n$, $n = 1, \cdots, 2N+1$ mit den Einträgen

$$\vec{v}_n \quad = \quad (v_{n,\ell})_{\ell=1,\cdots,2N+1}\ , \qquad n = 1, \cdots, 2N+1 \tag{9}$$

mit

$$v_{n,\ell} \quad = \quad \left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{\ell}{2}} \sin\tfrac{\pi \ell n}{2N+2} \quad = \quad (-1)^{\frac{\ell}{2}} \sin\tfrac{\pi \ell n}{2N+2} \quad = \quad i^\ell \sin\tfrac{\pi \ell n}{2N+2} \tag{10}$$

d) (Das wird jetzt ein bischen länglich, diesen Aufgabenteil können Sie auch ignorieren.)

Verschaffen wir uns vielleicht zunächst mal numerisch einen Überblick. Wir schreiben die $\vec{v}_n$ aus (9,10) in eine Matrix

$$V \quad := \quad \begin{pmatrix} | & & | \\ \vec{v}_1 & \cdots & \vec{v}_{2N+1} \\ | & & | \end{pmatrix}$$

Wenn wir mit $V^+ = \bar{V}^T$ die adjungierte Matrix bezeichnen, dann liefert das Matrixprodukt

$$V^+V \quad = \quad \big(\ \vec{v}_r \cdot \vec{v}_s\ \big)_{1\leq r,s\leq 2N+1}$$

gerade die Skalarprodukte und wir können die Norm der $\vec{v}_n$ ablesen. Für $N = 50$ bekommen wir das folgende auf der nächsten Seite, das Norm-Quadrat scheint also ein $N+1$ zu sein und wir redefinieren die $\vec{v}_n$ durch

$$v_{n,\ell} \quad := \quad \tfrac{1}{\sqrt{N+1}}\, i^\ell \sin\tfrac{\pi \ell n}{2N+2}\quad , \tag{11}$$

diese normierten $\vec{v}_n$ bilden dann also eine ONB des $\mathbb{C}^{2N+1}$.

```
> N = 50
>
> ell = 1:(2*N+1)
> V = matrix(0,2*N+1,2*N+1)
>
> for(n in 1:(2*N+1) )
+ {
+   v = exp(1i*pi/2*ell) * sin(pi*n*ell/(2*N+2))
+   V[,n] = v
+ }
>
> Vadj = t(Conj(V))
> zapsmall(Vadj%*%V)
       [,1]  [,2]  [,3]  [,4]  [,5]  [,6]  [,7]  [,8]  [,9] [,10] [,11] [,12] [,13] [,14] [,15] [,16] [,17] [,18] [,19] [,20
 [1,] 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
 [2,]  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
 [3,]  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
 [4,]  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
 [5,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
 [6,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
 [7,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
 [8,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
 [9,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
[10,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
[11,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
[12,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
[13,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
[14,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
[15,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
[16,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
[17,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0i  0+0
[18,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0i  0+0
[19,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0i  0+0
[20,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i 51+0
[21,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
[22,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
[23,]  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0i  0+0
```

Die normierten ebenen Wellen Eigenfunktionen von D_{pc} waren gegeben durch

$$\begin{aligned} \vec{e}_j &= \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \left(e^{i\,2\pi \frac{jm}{2N+1}} \right)_{m=-N,\cdots,+N} = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \left(e^{i\,2\pi \frac{j(\ell-N-1)}{2N+1}} \right)_{\ell=1,\cdots,2N+1} \\ &= \frac{e^{-\,i\,2\pi \frac{j(N+1)}{2N+1}}}{\sqrt{2N+1}} \left(e^{i\,2\pi \frac{j\ell}{2N+1}} \right)_{\ell=1,\cdots,2N+1} =: c_j \left(e^{i\,2\pi \frac{j\ell}{2N+1}} \right)_{\ell=1,\cdots,2N+1} \end{aligned}$$

mit

$$c_j := \frac{e^{-\,i\,2\pi \frac{j(N+1)}{2N+1}}}{\sqrt{2N+1}}$$

Da die $\{\vec{v}_n\}_{n=1}^{2N+1}$ eine ONB von $\mathbb{C}^{2N+1}$ sind, können wir die ebenen Wellen nach den $\vec{v}_n$ entwickeln:

$$\vec{e}_j = \sum_{n=1}^{2N+1} (\vec{e}_j, \vec{v}_n)\, \vec{v}_n$$

mit den Skalarprodukten

$$(\vec{e}_j, \vec{v}_n) = \sum_{\ell=1}^{2N+1} e_{j,\ell}\, \bar{v}_{n,\ell}$$

Dabei gilt

$$1 = \|\vec{e}_j\|^2 = \sum_{n=1}^{2N+1} |(\vec{e}_j, \vec{v}_n)|^2$$

Da die $\vec{e}_j$ ebenfalls eine ONB bilden, könnten wir auch entwickeln

$$\vec{v}_n = \sum_{j=-N}^{+N} (\vec{v}_n, \vec{e}_j)\, \vec{e}_j$$

und haben insbesondere auch

$$1 \;=\; \|\vec{v}_n\|^2 \;=\; \sum_{j=-N}^{+N} |(\vec{e}_j, \vec{v}_n)|^2$$

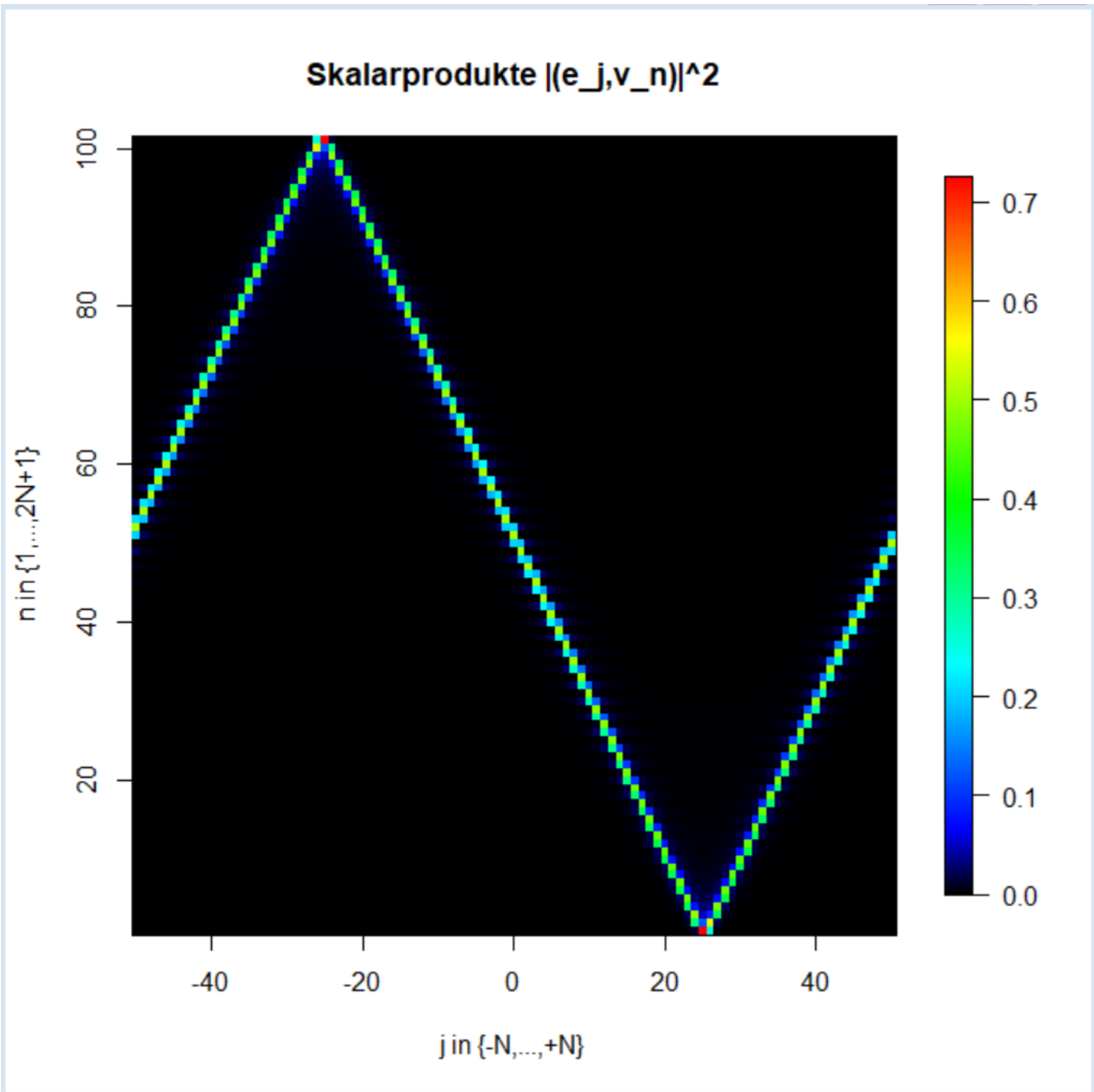
Wenn wir also die Matrix mit den Skalarprodukten

$$P \;= (\, p_{jn} \,) \;=\; \left(\, |(\vec{e}_j, \vec{v}_n)|^2 \,\right)_{-N \le j \le +N \,,\, 1 \le n \le 2N+1}$$

definieren, dann sind die Zeilensummen und die Spaltensummen gleich 1,

$$\sum_{n=1}^{2N+1} p_{jn} \;=\; \sum_{n=1}^{2N+1} |(\vec{e}_j, \vec{v}_n)|^2 \;=\; 1 \;=\; \sum_{j=-N}^{+N} |(\vec{e}_j, \vec{v}_n)|^2 \;=\; \sum_{j=-N}^{+N} p_{jn}$$

Schauen wir uns diese Matrix numerisch an. Für $N = 50$ bekommt man etwa das folgende Bild:



Die n, die zu gebenen j die relevanten Beiträge liefern, sind offensichtlich gerade gegeben durch die entsprechende Zuordnung der Eigenwerte λ_j^{pc} zu den λ_n^{dc}, die wir uns in Aufgabe 2b überlegt hatten, das war

$$n \;=\; \begin{cases} 2j+3N+2 & \text{für } \; j < -N/2 \\ N-2j+1 & \text{für } \; -N/2 \leq j \leq +N/2 \\ 2j-N & \text{für } \; j > +N/2 \end{cases}$$

Versuchen wir jetzt also, etwa für den Fall $-N/2 \leq j \leq +N/2$, das Skalarprodukt, wo wir zu gegebenen j den grössten Beitrag erwarten, analytisch zu berechnen. Für $-N/2 \leq j \leq +N/2$ ist das das Skalarprodukt

$$(\vec{e}_j, \vec{v}_n) \;=\; (\vec{e}_j, \vec{v}_{N-2j+1}) \tag{12}$$

Schreiben wir uns vielleicht zunächst die Koordinaten von $\vec{v}_{N-2j+1}$ hin. Es war

$$v_{n,\ell} \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{N+1}}\, i^\ell \sin \tfrac{\pi \ell n}{2N+2}$$

Also,

$$\begin{aligned} v_{N-2j+1,\ell} &= \tfrac{1}{\sqrt{N+1}}\, i^\ell \sin \tfrac{\pi\ell(N-2j+1)}{2N+2} \\ &= \tfrac{1}{\sqrt{N+1}}\, i^\ell \sin\left[\tfrac{\pi\ell}{2} - \tfrac{\pi j \ell}{N+1}\right] \\ &= \tfrac{1}{\sqrt{N+1}}\, i^\ell \left\{\sin\tfrac{\pi\ell}{2}\cos\tfrac{\pi j\ell}{N+1} \;-\; \cos\tfrac{\pi\ell}{2}\sin\tfrac{\pi j \ell}{N+1}\right\} \end{aligned}$$

Für gerades $\ell = 2m$ ist das

$$\begin{aligned} v_{N-2j+1,2m} &= \tfrac{1}{\sqrt{N+1}}\, i^{2m} \left\{\sin\pi m\cos\tfrac{\pi j\ell}{N+1} \;-\; \cos\pi m\sin\tfrac{\pi j \ell}{N+1}\right\} \\ &= \tfrac{1}{\sqrt{N+1}}\, (-1)^m \left\{\; 0 \;-\; (-1)^m \sin\tfrac{\pi j\ell}{N+1} \;\right\} \\ &= \;-\; \tfrac{1}{\sqrt{N+1}}\; \sin\tfrac{\pi j \ell}{N+1} \end{aligned}$$

Und für ungerades $\ell = 2m+1$ wird das

$$\begin{aligned} v_{N-2j+1,2m+1} &= \tfrac{1}{\sqrt{N+1}}\, i^{(2m+1)} \left\{\sin\left[\tfrac{\pi}{2}(2m+1)\right]\cos\tfrac{\pi j\ell}{N+1} \;-\; \cos\left[\tfrac{\pi}{2}(2m+1)\right]\sin\tfrac{\pi j \ell}{N+1}\right\} \\ &= \tfrac{1}{\sqrt{N+1}}\, i\, (-1)^m \left\{\; (-1)^m \cos\tfrac{\pi j\ell}{N+1} \;-\; 0 \;\right\} \\ &= \tfrac{1}{\sqrt{N+1}}\; i\; \cos\tfrac{\pi j \ell}{N+1} \end{aligned}$$

Also,

$$v_{N-2j+1,\ell} \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{N+1}} \begin{cases} -\sin\tfrac{\pi j\ell}{N+1} & \text{für } \; \ell = 2m \\ i\,\cos\tfrac{\pi j \ell}{N+1} & \text{für } \; \ell = 2m+1 \end{cases} \tag{13}$$

Um das mit den Einträgen der $\vec{e}_j$ zu vergleichen, die waren

$$e_{j,\ell} \;=\; \frac{e^{-i\,2\pi\frac{j(N+1)}{2N+1}}}{\sqrt{2N+1}}\; e^{i\,2\pi\frac{j\ell}{2N+1}} \;=\; c_j\Big\{\cos 2\pi\tfrac{j\ell}{2N+1} \;+\; i\,\sin 2\pi\tfrac{j\ell}{2N+1}\Big\} \tag{14}$$

können wir (13) auch folgendermassen schreiben:

$$v_{N-2j+1,\ell} \;=\; \frac{i}{\sqrt{N+1}} \begin{cases} i\,\sin 2\pi\frac{j\ell}{2N+2} & \text{für } \ell = 2m \\ \cos 2\pi\frac{j\ell}{2N+2} & \text{für } \ell = 2m+1 \end{cases}$$

Das ist also fast dasselbe, allerdings immer nur der Real- oder Imaginärteil. Beides zusammen geht auch nicht, weil dann der Betrag 1 wäre und damit keine Dirichlet-Randbedingungen möglich wären. Berechnen wir jetzt das Skalarprodukt (12). Wir bekommen

$$\begin{aligned}
(\vec{e}_j, \vec{v}_{N-2j+1}) \;&=\; \sum_{\ell=1}^{2N+1} e_{j,\ell}\,\bar{v}_{N-2j+1,\ell} \\
&= \sum_{m=1}^{N} e_{j,2m}\,\bar{v}_{N-2j+1,2m} \;+\; \sum_{m=0}^{N} e_{j,2m+1}\,\bar{v}_{N-2j+1,2m+1} \\
&= -\frac{c_j}{\sqrt{N+1}} \sum_{m=1}^{N} e^{i\,2\pi\frac{j2m}{2N+1}} \sin 2\pi\frac{j2m}{2N+2} \;-\; \frac{i\,c_j}{\sqrt{N+1}} \sum_{m=0}^{N} e^{i\,2\pi\frac{j(2m+1)}{2N+1}} \cos 2\pi\frac{j2m}{2N+2} \\
&= -\frac{c_j}{\sqrt{N+1}} \sum_{m=1}^{N} e^{i\,2\pi\frac{j2m}{2N+1}}\, \frac{e^{i2\pi\frac{j2m}{2N+2}} - e^{-i2\pi\frac{j2m}{2N+2}}}{2i} \\
&\quad - \frac{i\,c_j}{\sqrt{N+1}} \sum_{m=0}^{N} e^{i\,2\pi\frac{j(2m+1)}{2N+1}}\, \frac{e^{i2\pi\frac{j(2m+1)}{2N+2}} + e^{-i2\pi\frac{j(2m+1)}{2N+2}}}{2} \\
&= +\frac{1}{2i}\frac{c_j}{\sqrt{N+1}} \sum_{m=1}^{N} e^{i\,2\pi\frac{j2m}{2N+1}}\, e^{-i2\pi\frac{j2m}{2N+2}} \\
&\quad - \frac{i}{2}\frac{c_j}{\sqrt{N+1}} \sum_{m=0}^{N} e^{i\,2\pi\frac{j(2m+1)}{2N+1}}\, e^{-i2\pi\frac{j(2m+1)}{2N+2}} \;+\; \text{rest}
\end{aligned}$$

mit dem Rest

$$\begin{aligned}
\text{rest} \;=\; &-\frac{1}{2i}\frac{c_j}{\sqrt{N+1}} \sum_{m=1}^{N} e^{+i\,2\pi\frac{j2m}{2N+1}}\, e^{+i2\pi\frac{j2m}{2N+2}} \\
&-\frac{i}{2}\frac{c_j}{\sqrt{N+1}} \sum_{m=0}^{N} e^{+i\,2\pi\frac{j(2m+1)}{2N+1}}\, e^{+i2\pi\frac{j(2m+1)}{2N+2}}
\end{aligned}$$

Wir schreiben Rest, weil da zu erwarten ist, dass der ziemlich nullig ist, weil wir $e^{+i2\pi\cdots}e^{+i2\pi\cdots}$ haben und sich die Phasen da nicht gegeneinander wegcanceln. Also,

$$\begin{aligned}
(\vec{e}_j, \vec{v}_{N-2j+1}) \;&=\; -\frac{i}{2}\frac{c_j}{\sqrt{N+1}} \Big\{ \sum_{m=1}^{N} e^{i\,2\pi\frac{j2m}{2N+1} - i2\pi\frac{j2m}{2N+2}} + \sum_{m=0}^{N} e^{i\,2\pi\frac{j(2m+1)}{2N+1} - i2\pi\frac{j(2m+1)}{2N+2}} \Big\} \;+\; \text{rest} \\
&= -\frac{i}{2}\frac{c_j}{\sqrt{N+1}} \sum_{\ell=1}^{2N+1} e^{i\,2\pi\frac{j\ell}{2N+1} - i2\pi\frac{j\ell}{2N+2}} \;+\; \text{rest} \\
&= -\frac{i}{2}\frac{c_j}{\sqrt{N+1}} \sum_{\ell=1}^{2N+1} e^{i\,2\pi j[\frac{1}{2N+1} - \frac{1}{2N+2}]\ell} \;+\; \text{rest} \\
&= -\frac{i}{2}\frac{c_j}{\sqrt{N+1}}\, q\, \frac{1-q^{2N+1}}{1-q} \;+\; \text{rest}
\end{aligned}$$

mit

$$q \;=\; e^{i\,2\pi j[\frac{1}{2N+1}-\frac{1}{2N+2}]} \;=\; e^{i\,2\pi j\,\frac{1}{(2N+1)(2N+2)}}$$

Damit bekommen wir für grosse N

$$\begin{aligned}\frac{1-q^{2N+1}}{1-q} &= \frac{1-e^{i\,2\pi j\,\frac{1}{2N+2}}}{1-e^{i\,2\pi j\,\frac{1}{(2N+1)(2N+2)}}} = \frac{-i\,2\pi j\,\frac{1}{2N+2} \;+\; O(\frac{1}{N^2})}{-i\,2\pi j\,\frac{1}{(2N+1)(2N+2)} \;+\; O(\frac{1}{N^3})}\\ &= 2N \;+\; O(1)\end{aligned}$$

Wegen

$$\frac{c_j}{\sqrt{N+1}} \;=\; \frac{e^{-\,i\,2\pi\,\frac{j(N+1)}{2N+1}}}{\sqrt{2N+1}\sqrt{N+1}}$$

erhalten wir dann im Limes $N\to\infty$

$$\begin{aligned}\lim_{N\to\infty}(\vec{e}_j,\vec{v}_{N-2j+1}) &= \lim_{N\to\infty}\Big\{-\frac{i}{2}\,\frac{e^{-\,i\,2\pi\,\frac{j(N+1)}{2N+1}}}{\sqrt{2N+1}\sqrt{N+1}}\;q\;\frac{1-q^{2N+1}}{1-q} \;+\; \text{rest}\Big\}\\ &= -\frac{i}{2}\,\frac{e^{-i\pi j}\,2}{\sqrt{2}} \;+\; \lim_{N\to\infty}\text{rest}\\ &= i\,(-1)^{j+1}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\end{aligned}$$

wenn wir mal annehmen, dass der Rest nach 0 konvergiert, was wir analytisch natürlich noch nachrechnen könnten. Insbesondere haben wir dann

$$\lim_{N\to\infty}|(\vec{e}_j,\vec{v}_{N-2j+1})|^2 \;=\; \frac{1}{2}$$

was sich dann auch numerisch leicht überprüfen lässt. Damit haben wir also einen wesentlichen Beitrag in der Entwicklung

$$\vec{e}_j \;=\; \sum_{n=1}^{2N+1}(\vec{e}_j,\vec{v}_n)\,\vec{v}_n$$

mit

$$\sum_{n=1}^{2N+1}|(\vec{e}_j,\vec{v}_n)|^2 \;=\; 1$$

identifiziert, aber 'die andere Hälfte' fehlt noch, könnte man jetzt natürlich noch genauer analysieren, wo das herkommt.. Für den Moment belassen wir es mal dabei.