Hochschule RheinMain SS 2023
Prof. Dr. D. Lehmann

2. Übungsblatt zur Vorlesung Mathematische Methoden in der Quantenmechanik

Aufgabe 1: Wir betrachten die tridiagonale Matrix

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

Zeigen Sie, dass die Eigenwerte und Eigenvektoren durch die folgenden Ausdrücke gegeben sind:

$$A\,\vec{v}_n \;=\; \lambda_n\,\vec{v}_n$$

mit $n \in \{1, 2, \cdots, N\}$, den Eigenwerten

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

und den Eigenvektoren $\vec{v}_n = (v_{n,1}, \cdots, v_{n,N})$ mit den Einträgen

$$v_{n,j} \;=\; \left(\tfrac{c}{b}\right)^{\frac{j}{2}} \sin\tfrac{\pi j n}{N+1}\,, \quad j \in \{1, \cdots, N\}\;.$$

Aufgabe 2: Wir betrachten den diskretisierten Ortsraum

$$[-L, +L]_{\Delta x} \;=\; \left\{\, x_m = m\Delta x = m/M \;\middle|\; -LM \leq m \leq +LM \,\right\}$$

und die diskrete symmetrische Ableitung $(N := LM)$

$$D_{dc} \;:\; L^2\big([-L, +L]_{\Delta x}\big) \;\cong\; \mathbb{C}^{2N+1} \;\rightarrow\; \mathbb{C}^{2N+1}$$

mit Dirichlet-Randbedingungen, gegeben durch die $(2N+1)\times(2N+1)$ Matrix

$$D_{dc} \;=\; \frac{1}{2\Delta x}\begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 & 0 & \mathbf{0} \\ -1 & 0 & +1 & \ddots & 0 \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 & +1 \\ \mathbf{0} & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}\,,$$

das war die Gleichung (22) im week2.pdf.

a) Berechnen Sie die Eigenwerte von D_{dc} mit Hilfe von Aufgabe 1.

b) Vergleichen Sie diese Eigenwerte mit den Eigenwerten von D_{pc} aus dem Theorem 2.1. Ordnen Sie dazu die Eigenwerte der Grösse nach und plotten Sie sie dann, mit einer Software Ihrer Wahl, etwa für $L = 5$ und

$$\Delta x \;\in\; \{\, 1.0 \,,\, 0.1 \,,\, 0.01 \,\}$$

Also für jedes Δx ein neues Plot-Fenster und beide Sets von Eigenwerten, die *dc*-Eigenwerte und die *pc*-Eigenwerte, in den gleichen Plot, etwa mit unterschiedlichen Farben.

c) Berechnen Sie die Eigenvektoren von D_{dc} mit Hilfe von Aufgabe 1.

d) Entwickeln Sie eine ebene Welle $f_{k_j}(x_m) = e^{i\,k_j x_m}$, das ist eine Eigenfunktion von D_{pc} mit den entsprechenden k_j's aus dem week2, nach den Eigenvektoren von D_{dc}. Betrachten Sie den Kontinuumslimes $\Delta x \to 0$.