

Übungen zur Computational Physics

Aufgabe 15 — Lanczos-Methode

Warum ist die mit dem Lanczos-Verfahren berechnete approximative Grundzustandsenergie stets größer als die exakte Grundzustandsenergie?

Nehmen Sie an, dass der Startzustand des Lanczos-Verfahrens orthogonal zum exakten Grundzustand ist. Was kann man dann über das Ergebnis des Lanczos-Verfahrens aussagen?

Konstruieren Sie einen Algorithmus, der auf der Lanczos-Methode aufbaut und der in der Lage ist, eine mögliche Grundzustandsentartung aufzudecken! Wie kann man im Falle von Entartung den gesamten Eigenraum zur Grundzustandsenergie konstruieren?

Der Hamilton-Operator H sei durch eine 3×3 -Diagonalmatrix mit Diagonalelementen $-1, 0, 1$ gegeben. Führen Sie das Lanczos-Verfahren jeweils mit den Startzuständen $\mathbf{u}_0 = (1, 1, 1)$ und $\mathbf{u}_0 = (0, 0, 1)$ durch!

Aufgabe 16 — Trotter-Zerlegung

Zeigen Sie die Gültigkeit der Trotter-Zerlegung

$$\exp(x(A + B)) = \exp(xA) \exp(xB) + \mathcal{O}(x^2)$$

für beliebige lineare Operatoren A und B ! x ist eine reelle Zahl.