Übungen zur Vorlesung
Fortgeschrittene Theoretische Chemie A

Das Spektrum $\sigma(E)$ der Wellenfunktion ψ_0, $\sigma(E) = \langle\psi_0|\delta(H-E)|\psi_0\rangle$, wird approximativ mittels eines N-te Ordnung Lanczos-Verfahrens berechnet. In dieser Näherung ist das Spektrum dann durch

$$\sigma_N(E) = \sum_{i=1}^{N} \delta(E-E_i) \cdot |\langle E_i|\psi_0\rangle|^2$$

gegeben, wobei E_i und $|E_i\rangle$ die mittels des Lanczos-Verfahrens approximativen Energieeigenwerte und -eigenzustände sind. Zeigen Sie schrittweise, daß

$$\int dE\sigma(E) \cdot E^n = \int dE\sigma_N(E) \cdot E^n$$

für $n < N$ exakt erfüllt ist.

29. Betrachten Sie den Modellhamiltonoperator $H_N = \sum_{i=1}^{N} |E_i\rangle\, E_i\, \langle E_i|$. Für welche n gilt $H_N^n\,|\psi_0\rangle = H^n\,|\psi_0\rangle$?

30. Zeigen Sie, daß

$$\int dE\sigma_N(E) \cdot E^n = \langle\psi_0|H_N^n|\psi_0\rangle\,.$$

31. Zeigen Sie dann

$$\int dE\sigma_N(E) \cdot E^n = \int dE\sigma(E) \cdot E^n \quad ,$$

wobei $\sigma(E)$ das exakte Spektrum $\langle\psi_0|\delta(H-E)\psi_0\rangle$ ist.

32. Diskutieren Sie die Bedeutung der Momententreuheit des Lanczos-Verfahrens.