

Beispiel: Berechnen Sie den Grundzustand (Energie und Wellenfunktion) des harmonischen Oszillators mit  $\omega = 1$  ( $e = m_e = \hbar = 1$ ) mithilfe des Lanczos-Verfahrens. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit der analytischen Lösung

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{1}{2} \text{ (13.6 eV)}; \psi(x) = C \cdot e^{-x^2/2}.$$

Stellen Sie das Konvergenzverhalten der Methode dar.

**Lanczos-Algorithmus:** Startvektor  $\vec{s}_0, \beta_0 = |\vec{s}_0|; (\vec{q}_0 = 0)$

$$\begin{array}{l}
 \text{do } i=1, m \\
 \quad \vec{q}_i = \vec{s}_{i-1} / \beta_{i-1} \\
 \quad \vec{s}_i = \mathbf{A} \vec{q}_i - \beta_{i-1} \vec{q}_{i-1} \\
 \quad \alpha_i = \vec{q}_i^T \vec{s}_i \\
 \quad \vec{s}_i = \vec{s}_i - \alpha_i \vec{q}_i \\
 \quad \beta_i = |\vec{s}_i|, \quad i \leq m-1 \\
 \text{end do}
 \end{array}
 \rightarrow \mathbf{Q}; \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{m-1} \\ & & \beta_{m-1} & \alpha_m \end{pmatrix}$$