Computational Physics SoSe 2020
3. Übungsblatt

Ausgabe: 08.05.2020
Abgabe: 15.05.2020 10 Uhr

Priv.-Doz. Dr. Jörg Bünemann

Aufgabe 0: Verständnisfragen — 0 Punkte

1) Erklären Sie, wieso das Matrix-Vektor-Produkt $\mathcal{A}^n\vec{v}$ für steigende Potenzen n gegen den (unnormierten) Eigenvektor zum höchsten Eigenwert der Matrix $\mathcal{A}$ konvergiert. Was muss dabei für $\vec{v}$ und $\mathcal{A}$ gelten?

2) Welche Grundidee verbirgt sich hinter den Integrationsformeln von Newton und Cotes?

Aufgabe 1: Lanczos-Algorithmus — 10 Punkte

Mithilfe des Lanczos-Algorithmus können die extremalen Eigenwerte und -vektoren großer Matrizen äußerst effizient ermittelt werden. In dieser Aufgabe sollen Sie ihn anwenden um ein einfaches Festkörpermodell zu untersuchen. Wesentlich dabei ist, dass wir ausschließlich am Grundzustand interessiert sind, weshalb eine vollständige Diagonalisierung des Hamiltonoperators nicht nötig ist.

Betrachten Sie eine eindimensionale fermionische Kette aus N(N gerade) Gitterplätzen mit periodischen Randbedingungen. Es wird angenommen, dass sich ein Elektron auf dem Gitter befindet, sodass für die Basis die Notation $|i\rangle\,, i \in [1, ..., N]$ verwendet werden kann. Der Hamilton-Operator lautet in dieser Basis

$$\mathcal{H} = -t\sum_{i=1}^{N}\big(|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|\big) + \epsilon\,|N/2\rangle\langle N/2| \tag{1}$$

Der erste Term ist ein Einteilchen-Operator mit der Hüpfamplitude t und beschreibt die Bewegung von Teilchen zwischen den Gitterplätzen. Der zweite Term beschreibt eine Störstelle in der Mitte der Kette mit der potentiellen Energie ϵ. Beachten Sie, dass wegen der periodischen Randbedingungen $|N+1\rangle = |1\rangle$ gilt.

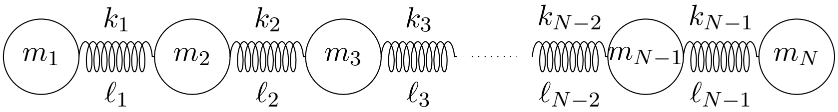
a) Implementieren Sie für eine Matrix $\mathcal{A}$ den in der Vorlesung vorgestellten Lanczos-Algorithmus mit einem zufälligen normierten Startvektor $\vec{q}$. Dabei soll der Algorithmus die Matrix zunächst auf die Tridiagonalform $\mathcal{T}$ bringen. Anschließend sollen daraus die Eigenwerte und Eigenvektoren berechnet werden. Interessant wird für diese Aufgabe nur der Grundzustand sein. Prüfen Sie nach jedem Iterationschritt mit einer Abbruchbedingung, ob der entsprechende Eigenwert sich nicht mehr signifikant ändert.
Hinweis: Sie können in Ihrem Algorithmus von einer reell symmetrischen Matrix $\mathcal{A}$ ausgehen und müssen entsprechend keine komplexen Zahlen verwenden.

b) Wie sieht die Matrix des Hamilton-Operators in der vorgeschlagenen Basis für eine Kette aus $N = 6$ Gitterplätzen aus? Konstruieren Sie die Matrix für $N = 50$ Gitterplätze in Ihren Programm und berechnen Sie den Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ und die Grundzustandsenergie E_0 für ein $\epsilon \in (-20, 20)$ mithilfe Ihrer Implementierung aus Aufgabenteil a). Setzen Sie dafür $t = 1$. Bestimmen Sie dann die Teilchendichte $N_i = |\langle\Psi_0\,|\,i\rangle|^2$ im Grundzustand. Was fällt Ihnen im Grenzfall sehr kleiner bzw. sehr großer ϵ auf?
Hinweis: Beachten Sie bei der Konstruktion der Matrizen die periodischen Randbedingungen.

c) Überlegen Sie anhand der Struktur des Hamilton-Operators in der vorgegebenen Basis, welche Speicherorganisation für große N angemessen ist.

Aufgabe 2: Federkette **5 Punkte**

Gegeben sei eine freie lineare Federkette mit Punktmassen m_i, Federkonstanten k_j und Federruhelängen ℓ_j mit $i \in \{1, \ldots, N\}$ und $j \in \{1, \ldots, N-1\}$.



1. Schreiben Sie ein Programm, dass bei vorgegebenen $\{m_i\}$, $\{k_j\}$ und $\{\ell_j\}$ für ein beliebiges N *alle* Eigenfrequenzen des Systems bestimmt. Dokumentieren Sie detailliert Ihre Lösungsstrategie.

2. Verwenden Sie Ihr Programm, um die Eigenfrequenzen eines Systems mit $N = 10$ und

$$m_i = i, \tag{2}$$
$$k_j = N - j, \tag{3}$$
$$\ell_j = |5 - j| + 1 \tag{4}$$

zu berechnen und geben Sie alle Eigenfrequenzen des Systems an. Alle physikalische Größen sind einheitenlos.

Hinweis: Die größte Eigenfrequenz des Systems ist $\omega_{\max} = 3,95439$.

Aufgabe 3: Integrationsroutinen und eindimensionale Integrale **5 Punkte**

Schreiben Sie eine Integrationsroutine für die

a) Trapezregel

b) Mittelpunktsregel

c) Simpsonregel

an die jeweils der Integrand $f(x)$, die Intervallgrenzen a, b und die Schrittweite h übergeben wird. Testen Sie ihre implementierten Integrationsroutinen mit den unten angegebenen Integralen. Halbieren Sie dazu die Intervallbreite h bis die relative Änderung des Ergebnisses kleiner als 10^{-4} wird.

(i)

$$I_1 = \int_1^{100} \mathrm{d}x \, \frac{\mathrm{e}^{-x}}{x} \tag{5}$$

(ii)

$$I_2 = \int_0^1 \mathrm{d}x \, x \sin\left(\frac{1}{x}\right) \tag{6}$$