**TRANSIÇÕES DE FASE**
Curso de Engenharia Física Tecnológica
Série 3b

1. No método de Lanczos parte-se de um dado estado $|0>$ e aplica-se repetidamente o Hamiltoniano, gerando a sequência de estados

$$\begin{aligned} \mathcal{H}|0> &= \epsilon_0|0> + \alpha_1|1> & (1) \\ \mathcal{H}|1> &= \alpha_1^*|0> + \epsilon_1|1> + \alpha_2|2> & (2) \\ \mathcal{H}|2> &= \alpha_2^*|1> + \epsilon_2|2> + \alpha_3|3> & (3) \end{aligned}$$

etc, que eventualmente é truncada, fazendo-se a diagonalização da matriz tridiagonal assim obtida, existindo, para isso, métodos especiais. No caso de haver degenerescência de estados, será necessário recomeçar usando um estado ortogonal ao anteriormente usado.

No método de Lanczos modificado trunca-se logo no segundo estado, ficando-se assim com a matriz

$$\mathcal{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & \alpha_1 \\ \alpha_1^* & \epsilon_1 \end{pmatrix}$$

na base dos estados $|0>, |1>$. Diagonalizando-se esta matriz obtêm-se os estados $|0>', |1>'$. O processo é iterado tomando agora o estado $|0>'$ como o novo estado $|0>$.

Obtenha as equações necessárias para escrever um programa de computador para calcular o estado fundamental e a sua energia, usando o método de Lanczos modificado. A grande vantagem computacional deste método é o facto de ser preciso guardar em memória três vectores apenas.