

Anmeldung zur Frühjahrstagung der
Deutschen Physikalischen Gesellschaft
vom 04.03. bis 08.03.2002
in Osnabrück

Nichthermitesche Multireferenz-Störungstheorie zur Berechnung elektronischer Resonanzzustände in Molekülen —
•CHRISTIAN BUTH, ROBIN SANTRA und LORENZ S. CEDERBAUM
— Theoretische Chemie, Physikalisch-Chemisches Institut, Universität Heidelberg, Im Neuenheimer Feld 229, 69120 Heidelberg, Deutschland

Die Berechnung elektronischer Resonanzen ist, trotz ihrer großen Bedeutung, noch keine Routineaufgabe. Die Hauptschwierigkeit liegt in der Behandlung des gestreuten Kontinuumelektrons und des gleichzeitig zu lösenden Vielteilchenproblems.

Wird ein komplexes absorbierendes Potentials (CAP) zum Hamiltonoperator hinzugefügt, so wird die Wellenfunktion des gestreuten Elektrons quadratintegrabel und Resonanzen auf diese Weise den Hilbertraumtechniken für gebundene Zustände zugänglich. Ein besonderer Vorteil der CAP-Methode ist die einfache Kombinierbarkeit mit elektronischen Korrelationsverfahren.

Im Vortrag wird mit Hilfe von Projektionsoperatortechniken die Verbindung eines CAPs mit der Multireferenz-Störungstheorie formuliert. Die zugrundeliegende Idee wird herausgearbeitet und verschiedene Aspekte der Theorie werden diskutiert.

Ort:	Osnabrück
Datum:	04.03.—08.03.2002
Fachverband:	Molekülphysik
Themenkreis:	Theorie
Beitragsform:	Vortrag
Email:	Christian.Buth@tc pci.uni-heidelberg.de
Mitgliedsstatus:	Deutsche Physikalische Gesellschaft