

Mehrreihen Π Verfahren am Beispiel anharmonischer Oszillatoren

Herbert H.H. Homeier

Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Regensburg

Methode

Resultate

ZIELE

- Bessere Nutzung der Information von Störungsreihen.
- Bessere Beschreibung angeregter Zustände

IDEE

Verwendung von Störungsreihen der Energie zur Bestimmung der Koeffizienten effektiver charakteristischer Polynome. Nullstellen des jeweiligen Polynoms sind bessere Approximationen der Energien.

NEUERUNG

Gleichzeitige Verwendung der Reihen zu mehreren Zuständen.

FORDERUNG

$$P_n(E_{0j} + z E_{1j} + z^2 E_{2j} + \dots) = O(z^{m_i+1})$$

ERGEBNIS $\Pi_{n,r}[m_1, m_2, \dots]$

r -te Wurzel des eff. char. Polynoms n -ten Grades aus Termen der i -ten Reihe bis zur Ordnung m_i .

ANWENDUNG

1-dim. anharmonischer Oszillator

$$H = p^2 + x^2 + z x^4$$

