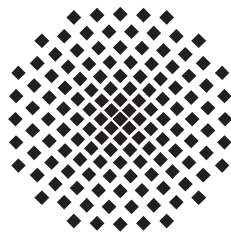


Untersuchung exzeptioneller Punkte bei Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern

Masterarbeit von
Matthias Feldmaier

09. Oktober 2015

Erster Prüfer: Prof. Dr. Jörg Main
Zweiter Prüfer: Prof. Dr. Maria Daghofer



1. Institut für Theoretische Physik
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	5
1.1. Motivation und Einführung in das Thema	5
1.2. Aufbau der Arbeit	6
2. Grundlagen	9
2.1. Resonanzen und komplexe Rotation	9
2.1.1. Grundlegende Eigenschaften von Resonanzen	9
2.1.2. Komplexe Koordinaten und komplexe Skalierung	11
2.1.3. Einfluss der komplexen Skalierung auf das Energiespektrum	13
2.2. Exzeptionelle Punkte	16
2.2.1. Grundlegende Eigenschaften exzeptioneller Punkte	16
2.2.2. Ein einfaches Beispiel	17
2.3. Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern	19
2.3.1. Wasserstoffartiges Modell zur Beschreibung von Exzitonen	20
2.3.2. Hamiltonoperator und Matrixdarstellung	21
2.3.3. Matrixaufbau und numerische Methoden	25
2.3.4. Ortsdarstellung einer Wellenfunktion in semiparabolischen Koordinaten	27
3. Nachweis exzeptioneller Punkte bei Exzitonen in parallelen el. und magn. Feldern	31
3.1. Resonanzen und vermiedene Kreuzungen	31
3.2. Vertauschungsverhalten der Eigenwerte eines EP	34
4. Bestimmung der exakten Position eines EP im Parameterraum	37
4.1. Das Matrixmodell – Beschreibung eines EP	37
4.2. Lineare Ordnung – Dreipunktmethode	38
4.2.1. Probleme der Dreipunktmethode	41
4.3. Quadratische Ordnung – Oktagonmethode	43
4.3.1. Iterationsschritt und Auswahl der richtigen Lösung	46
4.3.2. Konvergenzverhalten und Rechenzeit	50
4.3.3. Vertauschungsverhalten und Windungszahl	54
4.4. Beispiele für exzeptionelle Punkte	57

5. Wellenfunktionen in der Nähe eines exzeptionellen Punktes	65
5.1. Visualisierung der Ortsdarstellung einer Resonanz	65
5.2. Abhängigkeit vom Konvergenzparameter	67
5.3. Vertauschungsverhalten der Wellenfunktionen beim Umkreisen eines EP .	70
5.3.1. Videos zum Vertauschungsverhalten	74
5.4. Visualisierung der Wellenfunktion am EP	74
6. Zusammenfassung und Ausblick	79
A. Zweidimensionaler harmonischer Oszillator	83
B. Hartree-Einheiten	89
Literaturverzeichnis	91
Danksagung	93

1. Einleitung

Ein bei Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern auftretendes Phänomen sind sogenannte exzeptionelle Punkte. Ihre Untersuchung bietet eine einzigartige Möglichkeit, theoretische Vorhersagen und Berechnungen experimentell zu verifizieren, wobei sich die vorliegende Masterarbeit auf die theoretischen Aspekte konzentriert. Als Einstieg folgt hierzu eine kurze Einführung in das Thema sowie ein Überblick über den Aufbau der Arbeit.

1.1. Motivation und Einführung in das Thema

Das Wasserstoffatom in äußeren elektrischen und magnetischen Feldern ist ein wichtiges Beispiel für ein Quantensystem, das einerseits im Experiment zugänglich ist und sich andererseits in der Theorie numerisch behandeln lässt. Es ist daher besonders zur experimentellen Überprüfung theoretischer Vorhersagen geeignet. Anders herum kann das Wasserstoffatom auch als Modell dienen, um gemessene Daten theoretisch zu verstehen. So wurde z. B. 2014 von Kazimierczuk *et al* [1] bei Rydberg-Exzitonen in Cu_2O ein wasserstoffähnliches Spektrum nachgewiesen, welches sich im Rahmen eines wasserstoffartigen Modells in einer ersten Näherung erklären lässt. Die aus einem negativ geladenen Elektron und einem positiv geladenen Loch bestehenden Exzitonen stellen in diesem Fall das Festkörperanalogon zum Wasserstoffatom dar, wobei sie mit hoher Präzision im Kristall platziert und bewegt werden können [1].

Wie auch im Wasserstoffatom existieren in Exzitonen nicht nur gebundene Zustände. Oberhalb der Ionisationskante können quasigebundene oder metastabile Zustände gefunden werden, die sogenannten Resonanzen. Sie besitzen eine charakteristische Energie (oder Position im Energieraum) und eine Breite, welche ihre Lebensdauer bestimmt. Zu ihrer mathematischen Beschreibung muss die hermitesche Quantenmechanik um nicht-hermitesche Operatoren erweitert werden, was z. B. nach Reinhardt [2] durch die Einführung komplexer Koordinaten erreicht werden kann. Dadurch werden komplexe Energieeigenwerte möglich, welche über ihren Real- und Imaginärteil die Energie und die Breite von Resonanzen beschreiben.

Analog zu gebundenen Zuständen können Resonanzen ebenfalls entarten, d. h. ihre Energie und ihre Breite werden gleich. Eine besondere Form einer solchen Entartung ist der exzeptionelle Punkt. An diesem entarten nicht nur die Energieeigenwerte, sondern auch die zugehörigen Eigenvektoren [3]. Exzeptionelle Punkte finden sich in Systemen, die von mindestens zwei Parametern abhängen. Im Falle eines isolierten exzeptionellen Punktes

lassen sich die beteiligten Zustände nach Heiss [4] über ein zweidimensionales Matrixmodell beschreiben. Bei einer vollständigen, adiabatischen Umkreisung eines exceptionellen Punktes im Parameterraum vertauschen die beiden beteiligten Eigenwerte ihre Position im Energieraum. Dieses Vertauschungsverhalten lässt sich auch in den Knotenlinien der Wellenfunktionen der beiden beteiligten Zustände betrachten, es kommt zum Auftreten geometrischer Phasen, wie z. B. Jahre 2004 von Dembowski *et al* [5] in dissipativen Mikrowellenresonatoren nachgewiesen.

Für das Wasserstoffatom in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern wurde das Auftreten exceptioneller Punkte im Jahre 2008 im Rahmen einer Doktorarbeit von Holger Cartarius [6] gezeigt. Darauf aufbauend werden in dieser Masterarbeit im System des Exzitons in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern (ebenfalls wasserstoffartiges Modell) exceptionelle Punkte gesucht und ihre Eigenschaften erforscht. Die Motivation für den Schritt weg vom Wasserstoffatom und hin zum Exziton im Festkörper liegt in der experimentellen Überprüfbarkeit. Beim Wasserstoffatom sind exceptionelle Punkte nur für hohe Quantenzahlen experimentell zugänglich, da die erzeugbaren elektrischen und magnetischen Feldstärken in Labor begrenzt sind. Zur Beobachtung exceptioneller Punkten bei niedrigen Quantenzahlen wären wesentlich höhere Feldstärken notwendig. Auf theoretischer Seite sind jedoch nur Rechnungen für kleine Quantenzahlen möglich, da für die Berechnung exceptioneller Punkte bei höheren Quantenzahlen immer mehr Zustände der Wasserstoffatoms mit berücksichtigt werden müssen. Dadurch steigt einerseits die Größe der hierfür notwendigen Matrizen bis an die numerische Grenze an, andererseits wird dann auch eine immer größere Rechenzeit benötigt. Beim Exziton sind, bedingt durch die Festkörpereigenschaften, wesentlich geringere Stärken der externen Felder nötig, um eine hinreichend große Wechselwirkung der einzelnen Niveaus zur Bildung exceptioneller Punkte auch für niedrige Quantenzahlen zu ermöglichen. Sie bilden dadurch ein theoretisch und experimentell zugängliches System.

1.2. Aufbau der Arbeit

Kapitel 2 der vorliegenden Masterarbeit behandelt die theoretischen Grundlagen und Hintergründe. Beginnend mit einer Übersicht zu Resonanzen wird die Notwendigkeit komplexer Koordinaten motiviert und diese im Rahmen der komplexen Rotation eingeführt. Anschließend folgt eine Darstellung zu den Eigenschaften exceptioneller Punkte, welche an einem einfachen Beispiel erläutert werden. Der dritte Teil der Grundlagen behandelt dann das eigentliche Thema der Arbeit: das Exziton in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern. Beginnend mit der Motivation und einer Diskussion zur Gültigkeit des wasserstoffartigen Exzitonmodells folgt die Modellierung des Exzitons in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern. Anschließend werden die notwendigen Umrechnungen zur numerischen Lösung der verallgemeinerten Eigenwertgleichung gezeigt und die hierfür nötigen numerischen Methoden angesprochen. Da im Rahmen dieser Masterarbeit nicht nur die Eigenwerte, sondern auch die Wellenfunktionen der Zustände

eines exzeptionellen Punktes untersucht werden, folgt die Herleitung ihrer Ortsdarstellung in semiparabolischen Koordinaten. Kapitel 3 schildert den Nachweis exzeptioneller Punkte bei Exzitononen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern. Das hierfür nötige Vertauschungsverhalten der Eigenwerte wird dabei ausgehend von vermiedenen Kreuzungen zwischen zwei Resonanzen untersucht.

Kapitel 4 handelt von der Berechnung der exakten Position eines exzeptionellen Punktes in Parameter- und Energieraum. Als grundlegend wird hier die Beschreibung der beiden an der Bildung eines exzeptionellen Punktes beteiligten Resonanzen durch ein zweidimensionales Matrixmodell betrachtet. Im Rahmen einer linearen Näherung in den Feldstärken entsteht hieraus die Dreipunktmethod von Uzdin *et al* [7], die jedoch einige Probleme aufweist und sehr rechenintensiv ist. Ein großer Teil der vorliegenden Masterarbeit schildert deshalb die Entwicklung einer neuen Methode (Oktagonmethode) zum Auffinden von exzeptionellen Punkten unter Berücksichtigung quadratischer Terme in den Feldstärken. Anschließend werden Beispiele der so gefunden exzeptionellen Punkte graphisch dargestellt und tabellarisch mit den zugehörigen Feldstärken aufgeführt, um eine experimentelle Überprüfung dieser Ergebnisse zu ermöglichen.

Kapitel 5 befasst sich mit der Visualisierung der Wellenfunktionen der an der Bildung eines exzeptionellen Punktes beteiligten Zustände. Beginnend mit der Visualisierung einer einzelnen Resonanz folgt eine Diskussion zur Abhängigkeit vom Konvergenzparameter einer komplexen Rotation. Anschließend wird das Vertauschungsverhalten dieser Wellenfunktionen bei adiabatischer Umkreisung eines EP in Bild und Video dokumentiert und diskutiert. Zuletzt findet sich ein Abschnitt zur Visualisierung der Wellenfunktion direkt am exzeptionellen Punkt.

2. Grundlagen

Im Abschnitt 2.1 der vorliegenden Masterarbeit werden die zum Verständnis von exzeptionellen Punkten benötigten physikalischen Grundlagen aufgeführt. Angefangen mit Resonanzen als metastabile Zustände folgt ihre Beschreibung durch die komplexe Rotation. Der folgende Abschnitt 2.2 behandelt die Grundlagen zu exzeptionellen Punkten, welche aus diesen Resonanzen entstehen, erst allgemein, dann anhand eines sehr einfachen, aber anschaulichen Beispiels.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern anhand eines wasserstoffartigen Modells untersucht. Der Hamiltonoperator dieses Systems, sowie seine Matrixdarstellung sind Gegenstand des letzten großen Abschnitts 2.3 der Grundlagen. Hier findet sich auch eine Herleitung der Ortsdarstellung einer Wellenfunktion in semiparabolischen Koordinaten, wie sie später in der Arbeit zur Untersuchung von Resonanzen in der Nähe eines exzeptionellen Punktes auftaucht.

2.1. Resonanzen und komplexe Rotation

In diesem Teil der Grundlagen werden die grundlegenden Eigenschaften von Resonanzen als metastabile Zustände mit einer endlichen Lebensdauer eingeführt. Die Beschreibung einer solchen Resonanz als Observable eines hermiteschen Operators ist nicht möglich, weshalb dieses Konzept erweitert werden muss. Dies kann z. B. durch die Einführung komplexer Koordinaten geschehen, wodurch nicht-hermitesche Operatoren entstehen. Diese komplexen Skalierung und ihr Einfluss auf das Energiespektrum eines quantenmechanischen Systems wird in den folgenden beiden Abschnitten 2.1.2 und 2.1.3 diskutiert.

2.1.1. Grundlegende Eigenschaften von Resonanzen

Der Begriff *Resonanz* beschreibt einen nichtstationären oder quasigebundenen Zustand eines Quantensystems. In anderen Worten: ein Resonanzzustand ist definiert als langlebiger Zustand eines Systems, das genug Energie besitzt, um sich in zwei oder mehrere Untersysteme aufzuspalten [8]. Ein mathematisch einfaches Modell zur Beschreibung von Resonanzen sieht diese als im Ortsraum lokalisierte Zustände $\psi_{\text{R}}(0)$ (zur Zeit $t = 0$) mit der Zeitentwicklung

$$\psi_{\text{R}}(t) = e^{-i\frac{E_{\text{R}} t}{\hbar}} \psi_{\text{R}}(0) \quad , \quad (2.1)$$

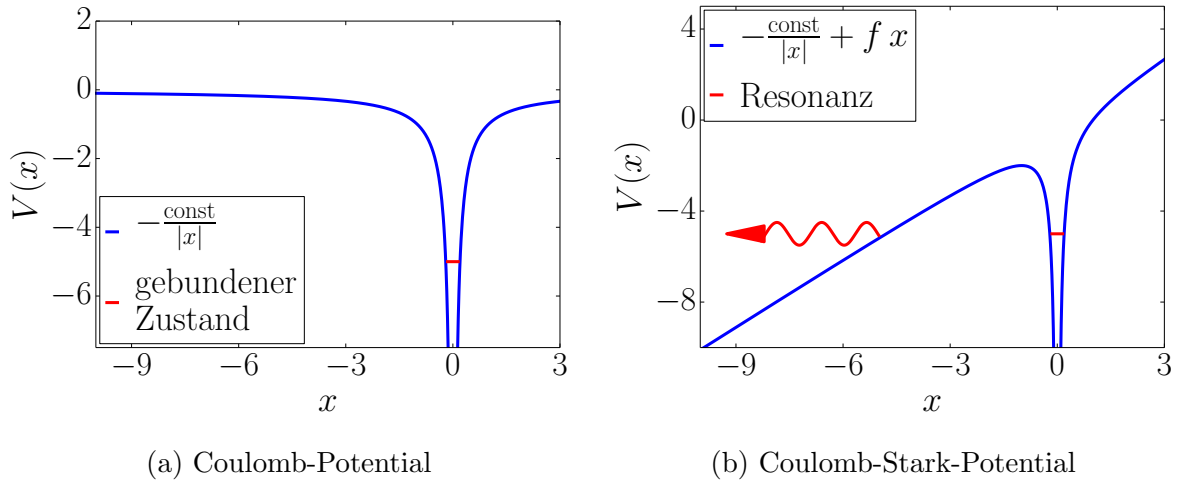


Abbildung 2.1.: a) Coulomb-Potential, wie es z. B. im Hamiltonoperator der vorliegenden Arbeit verwendet wird. Mit einer roten Linie ist ein gebundener Zustand eingezeichnet, der eine bestimmte Energie besitzt und welcher in diesem einfachen Modell nicht zerfallen kann. b) Durch das hinzufügen eines zweiten Potentialterms $f x$, z. B. durch ein elektrisches Feld F der Stärke $f = F/F_0$ entsteht ein Coulomb-Stark-Potential. Jetzt kann ein Elektron im selben Zustand mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durch die Potentialbarriere tunneln und in einen Streuzustand übergehen. Durch das äußere elektrische Feld entsteht demnach ein metastabiler Zustand, eine Resonanz.

d. h. der bekannten Zeitentwicklung für stationäre Zustände [2]. Die Energie E_R einer Resonanz ist jedoch komplex

$$E_R = E_{\text{res}} - i\frac{\Gamma}{2} \quad (2.2)$$

mit den reellen Größen E_{res} und $\Gamma \geq 0$. Der Term $-i\Gamma/2$ führt in Gleichung (2.1) zu einem exponentiell zerfallenden Zustand.

Anschaulich kann eine Resonanz anhand Abbildung 2.1 erklärt werden. In Abbildung 2.1a ist ein Coulomb-Potential skizziert, wie es im Hamiltonoperator der vorliegenden Arbeit Verwendung findet. Zusätzlich ist ein gebundener Zustand mit einer bestimmten Energie markiert, welcher in diesem einfachen Modell ohne weitere Zerfallskanäle stabil ist. Durch das Anlegen eines elektrischen Feldes F der Stärke $f = F/F_0$ entsteht ein Coulomb-Stark-Potential (vgl. Abbildung 2.1b). Jetzt kann ein Elektron im selben Zustand mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durch die Potentialbarriere tunneln und in einen Streuzustand übergehen. Durch das von einem externen elektrischen Feld hervorgerufene Potential wird der gebundene Zustand somit metastabil, d. h. zu einer Resonanz, welche eine bestimmte Lebensdauer besitzt.

2.1.2. Komplexe Koordinaten und komplexe Skalierung

Nach Werner Heisenberg können in der Quantenmechanik nur Observable als physikalische Messgröße interpretiert werden, welche mit einem hermiteschen Operator verknüpft sind, der wiederum reelle Eigenwerte besitzt. Hier können prinzipiell keine komplexen Eigenwerte auftreten, da die Eigenwerte hermitescher Operatoren immer reell sind.

Durch das Konzept der komplexen Eigenwerte lassen sich Energie und Lebensdauer von zerfallenden Zuständen berechnen, z.B. in Atomen, Molekülen oder allgemein, aller Art von Zerfallsmechanismen [2]. Um komplexe Eigenwerte nach Gleichung (2.2) aus einem Operator zu erhalten, muss dieser zwingend nicht-hermitesch sein.

Nicht-hermitesche Operatoren lassen sich durch die Einführung komplexer Koordinaten erzeugen, ihre Eigenzustände sind die in Abschnitt 2.1.1 vorgestellten Resonanzen. Die zugehörigen Eigenfunktionen dieser Resonanzen sind dabei quadratintegrabel, d.h. sie stellen lokalisierte Zustände innerhalb dieser komplexen Koordinaten dar.

Hier soll nun die Frage erörtert werden, inwiefern der mathematische Trick der Einführung komplexer Koordinaten auf physikalisch sinnvolle Ergebnisse führt und welche Bedingungen berücksichtigt werden müssen. Die Argumentation folgt dabei Ref. [2], wonach als anschauliches Beispiel der Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms für s -Zustände mit $l = 0$ dient

$$H(r) = -\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{1}{r} \quad . \quad (2.3)$$

Hier ist r die radiale Variable in sphärischen Polarkoordinaten. Für den Erwartungswert der Energie $\langle E \rangle$ folgt somit

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty R(r) \left[-\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{1}{r} \right] R(r) r^2 dr / \int_0^\infty R^2(r) r^2 dr \quad , \quad (2.4)$$

wobei eine Wellenfunktion der Form $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)/\sqrt{4\pi}$ mit einer reellen Funktion $R(r)$ angenommen wurde. Die Integration erstreckt sich dabei über die reelle Achse mit einer reellen Koordinate r .

Im Falle einer analytischen Funktion $R(r)$, z. B. $R(r) = 2 \exp(-r)$ ($1s$ -Funktion) kann das Integral in Gleichung (2.4) mit Hilfe des Cauchy'schen Integralsatzes¹ umgeschrieben werden in ein Linienintegral

$$\langle E \rangle = \int_C R(r) \left[-\frac{1}{2} \frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \rho^2 \frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} \right] R(\rho) \rho^2 d\rho / \int_C R^2(\rho) \rho^2 d\rho \quad (2.5)$$

über den Weg C , welches den Wert von $\langle E \rangle$ unverändert lässt. Solange ρ einen positiven Realteil besitzt, welcher die Konvergenz des Integrals (2.5) sicherstellt, muss der Pfad

¹Der Cauchy'sche Integralsatz besagt, dass das Linienintegral zwischen zwei Punkten in der komplexen Ebene für jeden möglichen, die Punkte verbindenden, Weg den selben Wert annimmt, sofern die zu integrierende Funktion holomorph ist.

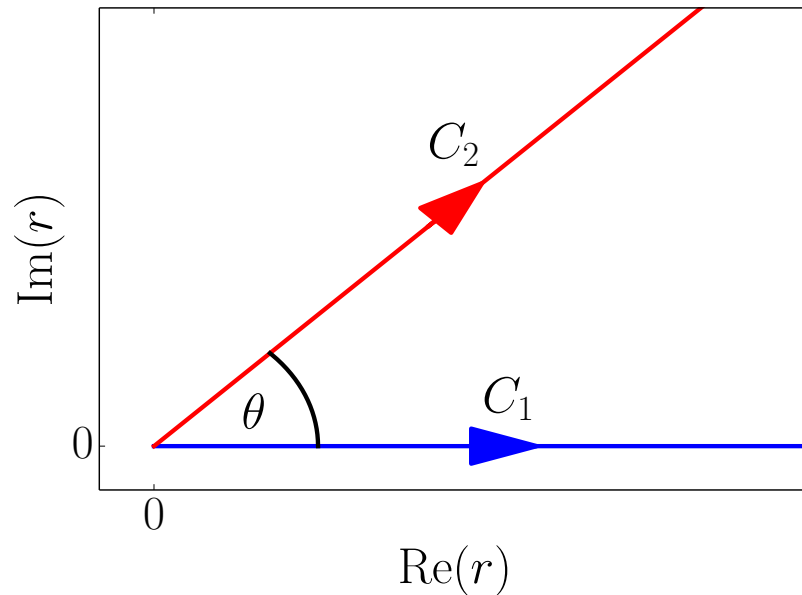


Abbildung 2.2.: Zwei mögliche Wege, das Integral aus Gleichung (2.5) zu berechnen. C_1 verläuft entlang der reellen Achse und entspricht dem Integral aus Gleichung (2.4). C_2 verläuft über die Koordinate $\rho = r \exp(i\theta)$ um den Winkel θ gedreht in der komplexen Ebene.

bei $r = \infty$ nicht einmal zur reellen Achse zurückkehren, da das „Rückkehr-Teilstück“ im Unendlichen keinen Beitrag zum Wert des Integrals liefert. Ein möglicher Weg C ist z. B. $C_2 : \rho = r \exp(i\theta)$, wobei der reelle Integrationsweg um den Winkel θ in die komplexe Ebene gedreht wird (vgl. Abbildung 2.2). Dabei ist der Winkel θ zunächst reell. Auf diesem Integrationsweg C_2 gilt für den Erwartungswert der Energie

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty e^{-r \exp(i\theta)} \left[-\frac{e^{-2i\theta}}{2} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{e^{-i\theta}}{r} \right] e^{-r \exp(i\theta)} (e^{i\theta} r)^2 e^{i\theta} dr}{\int_0^\infty (e^{-r \exp(i\theta)})^2 (e^{i\theta} r)^2 e^{i\theta} dr}, \quad (2.6)$$

wobei sich hier mit $\langle E \rangle = -1/2$ der selbe Wert wie beim reellen Integral errechnen lässt. Der Erwartungswert der Energie ändert sich demnach nicht, wenn die komplex skalierte Wellenfunktion

$$R(r e^{i\theta}) = 2e^{-r \exp(i\theta)} \quad (2.7)$$

zusammen mit dem skalierten Operator

$$-\frac{e^{-2i\theta}}{2} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{e^{-i\theta}}{r} \quad (2.8)$$

über die skalierte Größe $\exp(3i\theta) r^2 dr$ integriert wird.

Es ist somit irrelevant, ob r in $R(r)$ eine reelle oder eine komplexe Größe der Form $\rho = r e^{i\theta}$ ist, solange folgende Bedingungen nach Ref. [8] beachtet werden:

- r ist selbst keine Observable.
- Die Operatoren werden ebenfalls richtig komplex skaliert.
- Nur intrinsisch komplexe Anteile der Wellenfunktion werden bei der Berechnung eines Matrixelements komplex konjugiert (d. h. wenn $R(r)$ eine komplexe Funktion wäre, würde diese komplex konjugiert werden). Für den Skalierungsfaktor $\exp(i\theta)$ gilt dies jedoch nicht, da er nicht zu den intrinsischen Eigenschaften der Wellenfunktion zählt, sondern nur durch die komplexe Skalierung in das Integral (2.6) eingeht.

2.1.3. Einfluss der komplexen Skalierung auf das Energiespektrum

Nach dem Integralsatz von Cauchy muss das Integral (2.4) über den Integrationsweg C_1 entlang der reellen Achse (vgl. Abbildung 2.2) dem Integral (2.5) über C_2 entsprechen, sofern der Weg im Unendlichen von C_2 nach C_1 geschlossen wird. Für gebundene Zustände sind die Wellenfunktionen lokalisiert und verschwinden für $r \rightarrow \infty$. Das Integral über das Verbindungsstück zwischen C_1 und C_2 liefert in diesem Fall keinen Beitrag zum Erwartungswert der Energie. Die Energie gebundener Zustände ist aus diesem Grund invariant unter der komplexen Rotation $r \rightarrow r \exp(i\theta)$.

Im Energiespektrum quantenmechanischer Systemen gibt es neben den gebundenen Zuständen auch die Streuzustände, welche von der komplexen Rotation beeinflusst werden. Informationen hierzu finden sich z. B. in Ref. [2], die Darstellung in Ref. [6] ist jedoch etwas ausführlicher und dient deshalb für den nächsten Abschnitt als Grundlage.

Der Einfluss der komplexen Skalierung kann an Lösungen eines radialen Streuproblems verdeutlicht werden (Linearkombinationen von $\exp(ikr)/r$ und $\exp(-ikr)/r$ sofern das Wechselwirkungspotential nicht zu langreichweitig ist)

$$\psi_{\text{scatt}} = A(k) \frac{e^{ikr}}{r} + B(k) \frac{e^{-ikr}}{r} \quad . \quad (2.9)$$

Für $r \rightarrow \infty$ gilt dabei für die Energie (mit $m = \hbar = 1$)

$$E = \frac{k^2}{2} \quad . \quad (2.10)$$

Wird in Gleichung (2.9) eine komplexe Rotation der Form $r \rightarrow r \exp(i\theta)$ durchgeführt, so ergibt sich

$$\psi_{\text{scatt}} = A(k) \frac{e^{ikr \exp(i\theta)}}{r e^{i\theta}} + B(k) \frac{e^{-ikr \exp(i\theta)}}{r e^{i\theta}} \quad . \quad (2.11)$$

Einer der beiden Summanden dieser Wellenfunktion divergiert für $r \rightarrow \infty$ und reelle Werte von k . Die einzige Möglichkeit, eine physikalisch sinnvolle, nicht divergierende

Wellenfunktion ψ_{scatt} zu erhalten, ist für k ebenfalls eine komplexe Rotation der Form $k \rightarrow k \exp(-i\theta)$ durchzuführen. Hierdurch verändert sich die Energie der Streuzustände

$$E = \frac{k^2}{2} \rightarrow \frac{k^2 e^{-i2\theta}}{2} \quad , \quad (2.12)$$

sie werden um den Winkel -2θ in die komplexe Ebene rotiert (vgl. Abbildung 2.3). Dies gilt auch im Falle eines Coulomb-Problems, wenn die asymptotischen Wellenfunktionen von der Form $\exp(\pm ik r)/r$ abweichen [2].

Ein weiterer Effekt der komplexen Rotation ist das Auftreten von Resonanzen als neue, diskrete Eigenwerte in der unteren Hälfte der komplexen Energieebene. Anders als Streuzustände sind Resonanzen unabhängig vom Rotationswinkel (vgl. Gleichung (2.2)) und haben quadratintegrale Eigenfunktionen. Ein analytisches Beispiel ist nach Ref. [8] durch den inversen harmonischen Oszillator gegeben

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2} x^2 \quad . \quad (2.13)$$

Für das zugehörige Potential gibt es keine gebundenen Zustände und somit auch keine quadratintegralen Wellenfunktionen. Mit Hilfe der komplexen Rotation entsteht ein skaliertes Hamiltonoperator

$$H_s = -\frac{1}{2} e^{-i2\theta} \frac{d^2}{dx^2} - e^{i2\theta} \frac{1}{2} x^2 \quad . \quad (2.14)$$

Seine Lösungen sind die komplex skalierten Wellenfunktionen

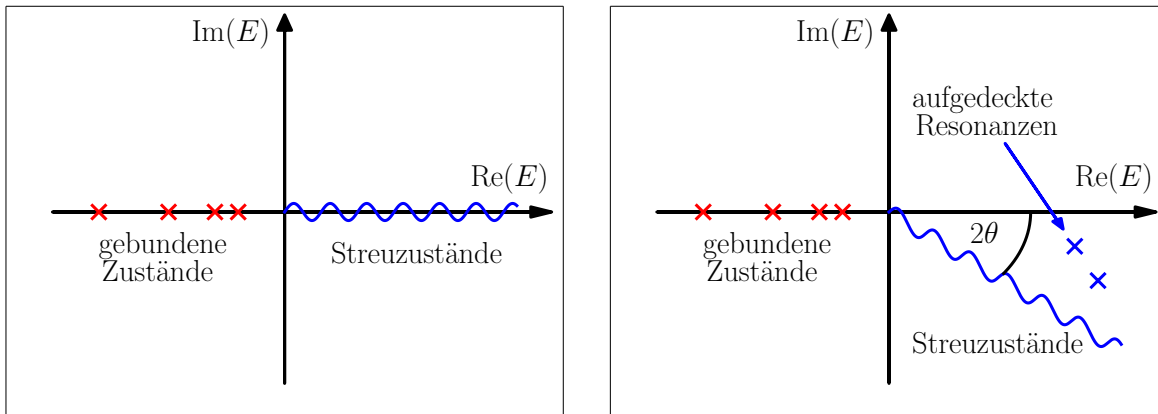
$$\psi_{n,s}(x e^{i\theta}) = c H_n \left(\frac{x}{\sqrt{i}} e^{i\theta} \right) \exp \left(i e^{i2\theta} \frac{x^2}{2} \right) \quad (2.15)$$

mit der Normierungskonstanten c und den Hermitepolynomen $H_n(x)$. Für die Energieeigenwerte des Hamiltonoperators (2.14) gilt

$$E_{n,s} = -i \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad . \quad (2.16)$$

Diese Eigenwerte sind demnach rein imaginär und entsprechen einer unendlichen Anzahl von Resonanzen mit Energie $E = 0$ und verschiedenen Lebensdauern $\Gamma = 2n + 1$. Wird der Winkel θ richtig gewählt, so werden die Eigenfunktionen in Gleichung (2.15) quadratintegral. Dieses Beispiel veranschaulicht, dass vorher nicht zum Hilbertraum gehörige Eigenfunktionen durch die komplexe Rotation quadratintegral gemacht werden können. Damit werden sie Teil des Hilbertraumes und der komplexe Energieerwartungswert existiert innerhalb seiner Lebensdauer als Resonanz.

Ein im Rahmen dieser Arbeit wichtiger Punkt zum Verhalten von Resonanzen lässt sich auch an diesem Beispiel erkennen und wird deshalb an dieser Stelle noch einmal deutlich hervorgehoben. Die spektrale Lage von Resonanzen in der komplexen Energieebene



(a) Spektrum ohne komplexe Rotation

(b) Spektrum mit komplexer Rotation

Abbildung 2.3.: a) Darstellung von gebundenen und Streuzuständen ohne komplexe Rotation. Das Energiespektrum befindet sich nur auf der reellen Achse. Resonanzen sind nicht sichtbar. b) Darstellung des Energiespektrums bei einer komplexen Rotation $r \rightarrow r \exp(i\theta)$, wodurch sich Hamiltonoperator und Wellenfunktion nach den Gleichungen (2.14) und (2.15) transformieren. Die gebundenen Zustände ändern ihre Lage nicht, die Streuzustände werden jedoch um den Winkel -2θ in die komplexe Ebene gekippt. Dadurch werden Resonanzen aufgedeckt, deren Lage wiederum unabhängig vom Winkel θ ist. Nach einer Abbildung in [6].

hängt nicht vom Drehwinkel der komplexen Rotation ab (siehe Gleichungen (2.16) und (2.2)). Der Drehwinkel muss groß genug sein, so dass die Resonanz in der komplexen Ebene sichtbar wird. Für größere Drehwinkel als dieser Grenzwinkel ändert sich jedoch nur noch die Lage der Streuzustände im Spektrum, nicht jedoch die Lage der Resonanz. Zusammengefasst gilt (vgl. hierzu Abbildung 2.3)

- Die gebundenen Zustände mit reeller Energie werden von der komplexen Rotation nicht beeinflusst.
- Die Energieeigenwerte der Streuzustände werden um einen Winkel -2θ in die komplexe Energieebene rotiert.
- Resonanzen werden in der komplexen Ebene aufgedeckt, sofern der Winkel θ der komplexen Rotation groß genug ist. Die spektrale Lage der Resonanzen hängt dabei selbst nicht vom Winkel θ ab.

2.2. Exzeptionelle Punkte

In diesem Teil der Grundlagen wird der Begriff *exzeptioneller Punkt* eingeführt und erläutert. Der Abschnitt orientiert sich dabei an Ref. [6]. Zum besseren Verständnis folgt anschließend ein sehr einfaches Beispiel eines exzeptionellen Punktes, das dessen wesentliche Eigenschaften zeigt. Es dient als grundlegende Einführung in das spätere Vorgehen am „realen“ quantenmechanischen System.

2.2.1. Grundlegende Eigenschaften exzeptioneller Punkte

Der Begriff *exzeptioneller Punkt* (EP) wird für einen Verzweigungspunkt verwendet, welcher in parameterabhängigen Eigenwertgleichungen auftreten kann. Als Beispiel nach Ref. [6] wird eine lineare Abbildung betrachtet

$$\mathbf{a} = \mathbf{T}(\kappa) \mathbf{b} \quad . \quad (2.17)$$

Hier sei $\mathbf{T}(\kappa)$ eine lineare Abbildung, welche holomorph² von einem skalar komplexen Parameter κ in einem Gebiet G der komplexen Ebene abhängt und $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$. Zur linearen Abbildung aus Gleichung (2.17) gehörende Eigenwerte λ ergeben sich aus der charakteristischen Gleichung

$$\det(\mathbf{T}(\kappa) - \lambda \mathbf{1}) = 0 \quad , \quad (2.18)$$

d. h. einer algebraischen Gleichung vom Grad n (der Dimension des Vektorraumes). Die Koeffizienten sind dabei holomorph in κ . Innerhalb des Gebietes G sind auch die Lösungen λ analytische Funktionen von κ oder Zweige von analytischen Funktionen, die nur algebraische Singularitäten besitzen [9].

Immer dann, wenn mindestens zwei Eigenwerte zu mindestens zwei Zweigen der selben analytischen Funktion gehören, können exzeptionelle Punkte auftreten. Sie sind die Verzweigungspunktsingularitäten (engl. branch point singularities) der analytischen Funktion und treten an isolierten Punkten im zweidimensionalen Parameterraum von κ auf. An genau diesen Punkten kommt es zu Entartungen von Eigenwerten, d. h. zwei oder mehr werden identisch. Somit nimmt die absolute Anzahl an unterschiedlichen Eigenwerten ab. An allen anderen Punkten im Gebiet G ist die Zahl der unterschiedlichen Eigenwerte unabhängig vom Parameter κ [10].

Das Auftreten exzeptioneller Punkte in einem zweidimensionalen Parameterraum (z. B. Real- und Imaginärteil von κ) hat verschiedene Konsequenzen:

1. Wird der exzeptionelle Punkt im Parameterraum vollständig umkreist, so tritt eine Vertauschung der am EP entartenden Eigenwerte auf [10].

²Eine Funktion f ist holomorph in einem Gebiet G , wenn sie in jedem Punkt $z_0 \in G$ unendlich oft komplex differenzierbar ist. Dies ist äquivalent dazu, dass die Funktion f in jedem Punkt z_0 von G in eine konvergente Potenzreihe der Form $\sum_{i=0}^{\infty} a_i (z - z_0)^i$ entwickelt werden kann.

2. Nicht nur die Eigenwerte, auch die Eigenvektoren entarten am exzeptionellen Punkt und zeigen ein Vertauschungsverhalten bei dessen Umkreisung [10]. Am exzeptionellen Punkt ist demnach die Dimension des Eigenraumes kleiner, als an jedem anderen Punkt im Parameterraum. Es gibt hier nur einen linear unabhängigen Eigenvektor für die beiden entarteten Eigenwerte. Dies unterscheidet einen exzeptionellen Punkt von einer „normalen“ Entartung von Eigenwerten.

2.2.2. Ein einfaches Beispiel

Ein einfaches Beispiel zu exzeptionellen Punkten und ihrem Verhalten findet sich in der nicht-hermiteschen linearen Abbildung nach [10]

$$\mathbf{M}(\kappa) = \begin{pmatrix} 1 & \kappa \\ \kappa & -1 \end{pmatrix} \quad ; \quad \kappa \in \mathbb{C} \quad . \quad (2.19)$$

Sie besitzt die beiden Eigenwerte

$$\lambda_1 = \sqrt{1 + \kappa^2} \quad \text{und} \quad \lambda_2 = -\sqrt{1 + \kappa^2} \quad . \quad (2.20)$$

Offensichtlich handelt es sich bei diesen Eigenwerten um zwei Zweige einer analytischen Funktion in κ . Bei $\kappa = \pm i$ entarten beide Eigenwerte, es existieren demnach zwei exzeptionelle Punkte in diesem System. Auch die beiden Eigenvektoren

$$\mathbf{v}_1(\kappa) = \begin{pmatrix} -\kappa \\ 1 - \sqrt{1 + \kappa^2} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{v}_2(\kappa) = \begin{pmatrix} -\kappa \\ 1 + \sqrt{1 + \kappa^2} \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

entarten an den beiden exzeptionellen Punkten und als einzig linear unabhängiger Eigenvektor verbleibt

$$\mathbf{v}(\pm i) = \begin{pmatrix} \pm i \\ 1 \end{pmatrix} \quad . \quad (2.22)$$

Das in Abschnitt 2.2.1 angesprochene Vertauschungsverhalten der Eigenwerte im Energieraum bei vollständiger Umkreisung des EP im Parameterraum lässt sich am Beispiel des Systems aus Gleichung (2.19) verdeutlichen. Der vollständige Kreis um den exzeptionellen Punkt bei $\kappa = +i$ wird im Parameterraum durch $\kappa(\phi) = i + \rho \exp(i\phi)$ beschrieben. Eine Darstellung diskreter Punkte auf diesem Kreis, sowie der zu jedem dieser Punkte berechneten Eigenwerte findet sich in Abbildung 2.4. Für einen gewählten Startpunkt im Parameterraum werden beide Eigenwerte berechnet. Jedem Eigenwert wird dabei eine Farbe zugeordnet. Nun werden weitere Eigenwerte für einen Kreis diskreter, kleiner Schritte im Parameterraum errechnet. Unter der Annahme, dass sich die Position der Eigenwerte im Energieraum³ für einen kleinen Schritt im Parameterraum nur geringfügig ändert, lassen sich die jeweils neu berechneten Eigenwerte farblich den vorherigen Werten

³Anmerkung: Die Bezeichnung *Energieraum* erfolgt im Anklang an die später in dieser Arbeit durchgeführten Rechnungen, in welchen komplexe Energieeigenwerte berechnet werden.

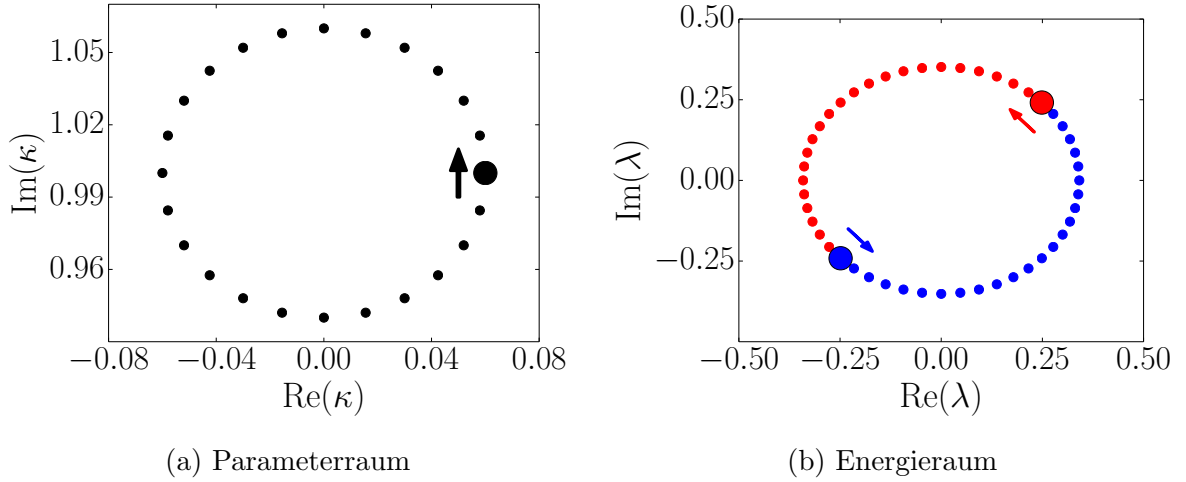


Abbildung 2.4.: a) Kreis im Parameterraum mit $\kappa(\phi) = i + \rho \exp(i\phi)$ um den exzeptionellen Punkt bei $\kappa = +i$. b) Berechnete Eigenwerte nach Gleichung (2.20) für jeden Punkt auf dem Kreis im Parameterraum. Die Startpunkte sind jeweils durch einen größeren Punkt markiert, die Pfeile geben die Umlaufrichtung an. Die Trajektorien der beiden Eigenwerte sind farblich gekennzeichnet. Bei einem vollständigen Umlauf im Parameterraum tauschen die beiden Eigenwerte ihre Position im Energieraum. Nach einer Abbildung in [6].

zuordnen (Minimierung des Abstandes zum vorherigen Punkt), sofern die Schritte auf dem Kreis im Parameterraum klein genug gewählt werden. Dadurch entstehen farblich gekennzeichnete Trajektorien, wie sie in Abbildung 2.4b dargestellt sind. Beim vollständigen Umkreisen des exzeptionellen Punktes im Parameterraum tauschen so die beiden Eigenwerte im Energieraum ihre Position.

Zur Veranschaulichung des Vertauschungsverhalten der Eigenwerte aus Gleichung (2.20) kann die Kreisparametrisierung $\kappa(\phi) = i + \rho \exp(i\phi)$ eingesetzt werden

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{1 + (i + \rho e^{i\phi})^2} = \pm \sqrt{\rho} e^{i\frac{\phi}{2}} \sqrt{2i + \rho e^{i\phi}} \stackrel{\rho \ll 2}{\approx} \pm \sqrt{2\rho} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{i\frac{\phi}{2}} \quad . \quad (2.23)$$

Es gilt somit für die beiden Eigenwerte

$$\lambda_1 = \sqrt{2\rho} e^{i(\frac{\pi}{4} + \frac{\phi}{2})} \quad \text{und} \quad \lambda_2 = \sqrt{2\rho} e^{i(\frac{5\pi}{4} + \frac{\phi}{2})} \quad . \quad (2.24)$$

Die beiden Eigenwerte gehen demnach für eine volle Umkreisung von $\phi = 2\pi$ im Parameterraum ineinander über und haben selbst eine Periodizität von 4π .

Bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Rechnungen waren die geschlossenen Pfade im Parameterraum keine Kreise, sondern Ellipsen. Dadurch verändern sich die Trajektorien vertauschender Eigenwerte im Energieraum zu einem sternförmigen Aussehen, wie in Abbildung 2.5 dargestellt. Im Gegensatz zu einer Kreisbahn ist der Abstand

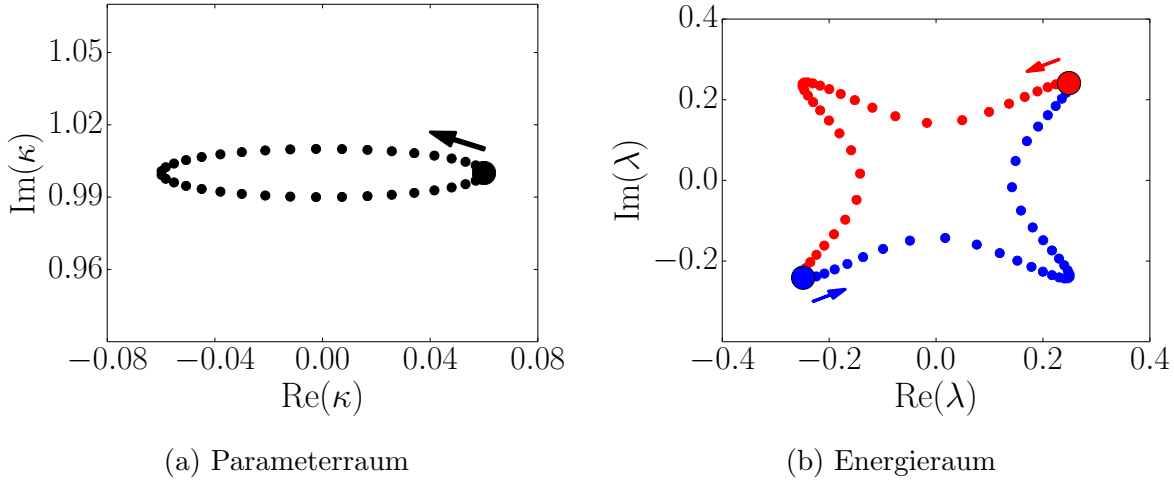


Abbildung 2.5.: a) Ellipse im Parameterraum mit $\kappa(\phi) = i + \rho_1 \cos(\phi) + i\rho_2 \sin(\phi)$ um den exzeptionellen Punkt bei $\kappa = +i$, wobei $\rho_2 \neq \rho_1$. b) Berechnete Energieeigenwerte nach Gleichung (2.20) für jeden Punkt auf der Ellipse im Parameterraum. Die Trajektorien im Energieraum erhalten dadurch ein sternförmiges Aussehen.

zum EP im Parameterraum beim Umlauf auf einer Ellipsenbahn nicht mehr konstant. Für Punkte näher am EP liegen die Eigenwerte näher beieinander (am EP würden sie entarten) während sich die Eigenwerte für vom EP entfernte Punkte voneinander entfernen und somit die Zacken einer Sternform ausbilden.

2.3. Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern

In Ref. [6] wurden Wasserstoffatome in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern auf das Auftreten exzeptioneller Punkte untersucht. In der vorliegenden Masterarbeit soll darauf aufbauend der Frage nachgegangen werden, ob bei Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern ebenfalls exzeptionelle Punkte gefunden werden können. Im ersten Unterkapitel 2.3.1 wird diskutiert, wie sich Exzitonen im Rahmen eines wasserstoffähnlichen Modells beschreiben lassen und welche Näherungen und Vereinfachungen dabei getroffen werden müssen. Die Argumentation folgt Ref. [11]. Im nächsten Unterkapitel 2.3.2 schließt sich die Modellierung des Systems an. Sie ist in abgewandelter Form (parallele äußere Felder) orientiert an der vorhergehenden Arbeit von Holger Cartarius (Ref. [6]). Weiterhin werden die für die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators benötigten, semiparabolischen Koordinaten hier eingeführt und erklärt. Anschließend folgt ein Abschnitt zur numerischen Implementierung des Systems und den verwendeten Programmpaketen. Im letzten Unterkapitel 2.3.3 dieses Grundlagenteils findet sich die

Herleitung der Ortsdarstellung einer Wellenfunktion des betrachteten Exzitons in semi-parabolischen Koordinaten. Sie wird im späteren Verlauf der Masterarbeit benötigt.

2.3.1. Wasserstoffartiges Modell zur Beschreibung von Exzitonen

Ein Festkörper im Grundzustand besitzt ein mit Elektronen vollständig besetztes Valenzband und ein leeres Leitungsband. Wird ein Elektron aus dem Valenz- ins Leitungsband gehoben (z. B. durch einen Laser mit einer zur Energielücke passenden Frequenz), so kann sich das negativ geladene Elektron im Leitungsband frei bewegen. Gleichzeitig entsteht ein frei bewegliches, positives Loch im Valenzband.

Für die Beschreibung solcher Quasiteilchen im Festkörper wird die *effektive-Masse-Näherung* verwendet. Im Rahmen dieser Näherung werden Wechselwirkungen, z. B. eines Elektrons mit der Vielzahl anderer Elektronen im Festkörper, in einer effektiven Masse (hier m_e) berücksichtigt. Diese Masse kann sich deutlich von der Vakuummasse des Teilchens (hier $m_{e,vac} = 9,109\,382\,15 \cdot 10^{-31}$ kg nach Ref. [12]) unterscheiden. Ein typischer Wert für die Elektronenmasse in Kupferoxid (Cu_2O) ist $m_e = 0,38 m_{e,vac}$ nach Ref. [13]. Eine Herleitung der effektiven-Masse-Näherung findet sich beispielsweise in Ref. [11]. Beide Quasiteilchen (Elektron und Loch) ziehen sich aufgrund ihrer gegensätzlichen Ladung Coulombartig an, es entsteht ein Elektron-Loch-Paar oder *Exziton*. Dieses wird beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$H_{e-h} = E_g + \frac{\vec{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}_h^2}{2m_h} - \frac{e^2}{\lambda|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \quad , \quad (2.25)$$

wobei E_g die Energie der Bandlücke bezeichnet. Es folgen die kinetischen Energien von Elektron und Loch. Der letzte Term beschreibt die Coulomb-Anziehung zwischen Elektron und Loch. Für den Fall von einem Valenz und einem Leitungsband im Vakuum wäre $\lambda = 4\pi\epsilon_0$ mit der Vakuumdielektrizitätszahl $\epsilon_0 = 8,854\,187\,817 \cdot 10^{-12} \frac{\text{As}}{\text{Vm}}$ [12]. Abschirmungseffekte in einem dielektrischen Material lassen sich durch Ersetzen von ϵ_0 mit $\epsilon = \epsilon_0\epsilon_r$ berücksichtigen, wobei ϵ_r (relative Dielektrizitätszahl) eine materialabhängige, dimensionslose Größe ist (z. B. $\epsilon_r = 7,50$ für Cu_2O nach Ref. [13] für np -Exzitonen mit $n \geq 3$).

Der Ansatz in Gleichung (2.25) betrachtet lediglich das Beispiel eines Valenz- und eines Leitungsbandes. Kopplungen an weitere Bänder sowie Austausch- oder Korrelationseffekte werden in diesem einfachen Modell vernachlässigt [11].

Gleichung (2.25) lässt sich in Relativ- und Schwerpunktskoordinaten separieren. Dazu gilt mit $\vec{p}_i = \hbar\vec{k}_i$, $i \in \{e, h\}$

$$\vec{k}_e = \vec{k} + \frac{m_e}{M} \vec{Q} \quad , \quad (2.26a)$$

$$\vec{k}_h = \vec{k} - \frac{m_h}{M} \vec{Q} \quad , \quad (2.26b)$$

wobei $M = m_e + m_h$ die Gesamtmasse des Exzitons beschreibt. Die neu eingeführte Größe \vec{Q} bezeichnet hierbei den Wellenvektor des Schwerpunktes und \vec{k} denjenigen relativ

zwischen den beiden betrachteten Teilchen. Aus Gleichung (2.25) wird dadurch

$$H_{e-h} = E_g - \frac{\hbar^2}{2m_{\text{red}}} \Delta - \frac{e^2}{\lambda r} + \frac{\hbar^2 Q^2}{2M} \quad . \quad (2.27)$$

Hierzu wurde $r = |\vec{r}_e - \vec{r}_h|$ gesetzt und die reduzierte Masse $m_{\text{red}} = (1/m_e + 1/m_h)^{-1}$ eingeführt. Der letzte Term in Gleichung (2.27) beschreibt die Schwerpunktsbewegung des Exzitons, die ersten drei Terme die Relativbewegung zwischen Elektron und Loch. Die Energie der Bandlücke E_g wirkt sich dabei nur als eine konstante Verschiebung der Energieskala aus.

Die mittleren beiden Terme aus Gleichung (2.27) liefern ein wasserstoffartiges Spektrum des Exzitons, charakterisiert durch die Rydberg-Energie $R_{\text{ex}} = R_H m_{\text{red}}/\varepsilon^2$ und den Exzitonen-Radius $a_{\text{ex}} = a_H \varepsilon/m_{\text{red}}$. Hierbei ist $R_H = 13,605\,791\text{ eV}$ die Rydberg-Energie des Wasserstoffatoms und $a_H = 0,529\,177\,249 \cdot 10^{-10}\text{ m}$ sein Bohrscher Radius [14]. Als Lösung der zu Gleichung (2.27) gehörigen Schrödingergleichung ergibt sich für $Q = 0$ ein Energiespektrum von $E_n = E_g - R_{\text{ex}}/n^2$ für $n \in \mathbb{N}_+$.

Die Rechnungen in der vorliegenden Arbeit werden durch die Verwendung von Hartree-Einheiten dimensionslos und materialunabhängig durchgeführt (siehe Anhang B). Die Materialparameter „verstecken“ sich dabei in den Einheiten. So entspricht beispielsweise ein Radius von Eins in Hartree Einheiten entweder genau dem Bohrschen Radius von $a_H = 0,529\,177 \cdot 10^{-10}\text{ m}$ im Falle der Betrachtung von Wasserstoff oder aber einem Radius von $a_{\text{ex}} = 1,044 \cdot 10^{-9}\text{ m}$ bei Cu_2O . Die Rydberg-Energie des Wasserstoffatoms mit $R_H = 13,605\,791\text{ eV}$ wird in Hartree-Einheiten zu einer Energie von $-0,5\text{ a.u.}$ (und ist damit ebenfalls dimensionslos⁴). Im Falle von Cu_2O entspricht dies einer Rydberg-Energie des Exzitons von $R_{\text{ex}} = -0,092\text{ eV}$. Die Unterschiede der einzelnen Größen in Cu_2O relativ zum atomaren Wasserstoff ergeben sich dabei allein aus der Verwendung von effektiver Masse und relativer Dielektrizitätszahl im Festkörper. Für die Umrechnung aus Hartree-Einheiten in SI-Einheiten benötigte Größen sind im Anhang B aufgeführt und anhand weiterer Beispiele erklärt.

2.3.2. Hamiltonoperator und Matrixdarstellung

Betrachtet wird ein Exziton in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern der Form

$$\vec{F} = F \hat{e}_z \quad \text{und} \quad \vec{B} = B \hat{e}_z \quad , \quad (2.28)$$

wobei die Stärke des elektrischen Feldes als F , die Stärke des magnetischen Feldes als B und der Einheitsvektor in z -Richtung mit \hat{e}_z bezeichnet ist. Unter der Annahme, dass der Kern des Exzitons im Vergleich zum Elektron unendlich schwer und damit raumfest ist, können Schwerpunkt- und Relativbewegung separiert werden. Unter Vernachlässigung

⁴Eine Größe, welche in Hartree-Einheiten dimensionslos ist, im SI-System jedoch eine Dimension besitzt, kann zur formalen Kennzeichnung die Einheit a.u. erhalten.

2. Grundlagen

relativistischer Korrekturen folgt nach Ref. [6] für den Hamiltonoperator der Relativbewegung

$$H = \frac{1}{2m_e} \vec{p}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{e}{2m_e} B L_z + \frac{e^2}{8m_e} B^2 (x^2 + y^2) + e F z \quad . \quad (2.29)$$

Hier bezeichnet m_e die Masse des Elektrons, e die Elementarladung und $L_z = (x p_y - y p_x)$ die z -Komponente des Drehimpulses. Die Größen \vec{p} und $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ beschreiben den Impuls des Elektrons sowie dessen radialen Abstand zum Kern. Der Hamiltonoperator (2.29) beinhaltet die kinetische Energie ($\propto \vec{p}^2$), die Coulomb-Wechselwirkung ($\propto 1/r$), den paramagnetischen Term ($\propto B L_z$), den diamagnetischen Term ($\propto B^2 (x^2 + y^2)$) und die potentielle Energie des Elektrons im elektrischen Feld ($\propto F z$).

Durch die Einführung von Hartree-Einheiten (Anhang B) lautet der Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2} \vec{p}^2 - \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \gamma L_z + \frac{1}{8} \gamma^2 (x^2 + y^2) + f z \quad , \quad (2.30)$$

wobei die Stärke des elektrischen Feldes $f \equiv F/F_0$ und jene des magnetischen Feldes $\gamma \equiv B/B_0$ im Falle von atomarem Wasserstoff relativ zu $F_0 = 5,14 \cdot 10^{11}$ V/m und $B_0 = 2,35 \cdot 10^5$ T gegeben ist. Die Energie wird hier in Einheiten der Hartree-Energie $E_h = 4,36 \cdot 10^{-18}$ J gemessen. Im Falle von Cu_2O ändern sich diese Größen zu $F_0 = 1,760 \cdot 10^8$ V/m, $B_0 = 603,4$ T und einer Energie von $2,945 \cdot 10^{-20}$ J (siehe Anhang B). Sie sind somit wesentlich kleiner, worin der Grund in der besseren experimentellen Zugänglichkeit von Cu_2O liegt.

Zur Berechnung der Energieeigenwerte muss die stationäre Schrödingergleichung $H \Psi = E \Psi$ für die Eigenfunktionen Ψ des Problems gelöst werden. Durch die parallel gewählten Felder aus Gleichung (2.28) handelt es sich dabei um ein radialsymmetrisches Problem, weshalb der Drehimpuls eine gute Quantenzahl ist. Aus diesem Grund kann der Drehimpulsoperator L_z durch die Drehimpulsquantenzahl m ersetzt werden. Es folgt

$$\left(\frac{1}{2} \vec{p}^2 - \frac{1}{r} + \frac{1}{8} \gamma^2 (x^2 + y^2) + f z \right) \Psi = E' \Psi \quad , \quad (2.31)$$

mit $E' \equiv E - \gamma m/2$.

Eine Möglichkeit zur numerischen Lösung der Schrödingergleichung (2.31) ist die Diagonalisierung in einer vollständigen Basis. Hierzu wird das Problem zunächst auf erweiterte, semiparabolische Koordinaten transformiert. Nach Ref. [6] sind diese gegeben durch

$$\mu = \frac{\mu_r}{b} = \frac{1}{b} \sqrt{r+z} \quad , \quad (2.32a)$$

$$\nu = \frac{\nu_r}{b} = \frac{1}{b} \sqrt{r-z} \quad , \quad (2.32b)$$

$$\varphi = \arctan\left(\frac{y}{x}\right) \quad , \quad (2.32c)$$

wobei $b \rightarrow |b| \exp(i\alpha)$ ein erweiterter, im allgemeinen Fall komplexer, Konvergenzparameter ist, der eine komplexe Rotation der reellen semiparabolischen Koordinaten (μ_r, ν_r, φ) um den reellen Drehwinkel α induziert. Es gilt $r = b^2 (\mu^2 + \nu^2)/2$.

Die inverse Transformation lautet

$$x = b^2 \mu \nu \cos(\varphi) \quad , \quad (2.33a)$$

$$y = b^2 \mu \nu \sin(\varphi) \quad , \quad (2.33b)$$

$$z = \frac{b^2}{2} (\mu^2 - \nu^2) \quad . \quad (2.33c)$$

Der Parameter $b \rightarrow |b| \exp(i\alpha)$ bewirkt eine komplexe Rotation, weshalb für den Radius

$$r \rightarrow r e^{i\theta} = r |b|^2 e^{2i\alpha} \quad (2.34)$$

gilt, wobei $\theta = u + iv$ aus Abschnitt 2.1.2 jetzt in der Verallgemeinerung als komplexer Drehwinkel mit Realteil u und Imaginärteil v aufzufassen ist [2]. Ein Vergleich der Größen in Formel (2.34) liefert $\exp(-v) = \exp(-\text{Im}(\theta)) = |b|^2$ und $u = \text{Re}(\theta) = 2\alpha$. Nach Abbildung 2.3b wird demnach bei der Wahl $b = |b| \exp(i\alpha)$ das Kontinuum um den Winkel 4α in die komplexe Ebene rotiert.

Semiparabolische Koordinaten sind besonders zur Darstellung eines zylindersymmetrischen Systems geeignet. In diesem Fall kann mit einer zweidimensionalen Auftragung (μ, ν) , unter Zuhilfenahme der Symmetrie im Radialwinkel ϑ um die z -Achse, der gesamte dreidimensionale Raum (r, ϑ, z) in Zylinderkoordinaten abgebildet werden. Dafür ist nur der rechte obere Quadrant des (μ, ν) -Raums erforderlich, d. h. nur Werte an positiven Koordinaten μ und ν . Der Winkel φ der semiparabolischen Koordinaten wird zur Darstellung eines zylindersymmetrischen Systems nicht benötigt und kann deshalb beliebig (z. B. $\varphi = 0$) gewählt werden.

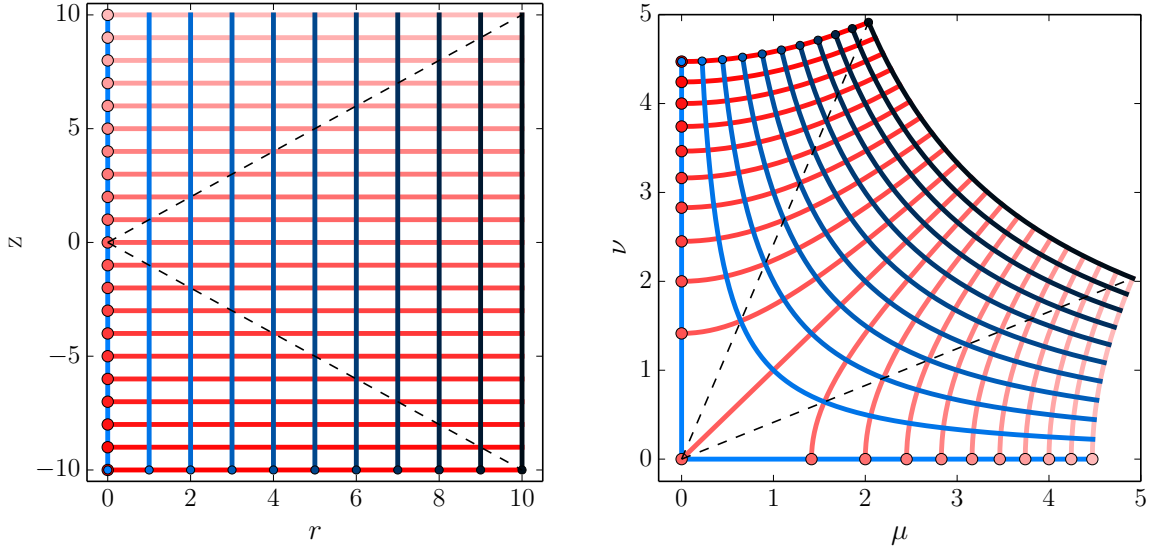
Abbildung 2.6 zeigt eine graphische Darstellung der Transformation von Zylinderkoordinaten (r, z) mit $(r = \sqrt{x^2 + y^2})$ in semiparabolische Koordinaten (μ, ν) für $\varphi = 0$ und $b = 1$, d. h. für eine reelle Transformation. Der negative Teil der z -Achse bildet dabei die $\mu = 0$, der positive Teil der z -Achse die $\nu = 0$ Achse. Die r -Achse bei $z = 0$ wird zur Winkelhalbierenden im (μ, ν) -Raum. Der sich über zwei Quadranten ausdehnende Raum (r, z) wird demnach in den rechten oberen Quadranten von (μ, ν) abgebildet. Die Transformation in semiparabolische Koordinaten entspricht einem Umklappen der negativen z -Achse um 90° im mathematisch positiven Sinn mit einer anschließenden Spiegelung an der neuen Winkelhalbierenden.

In den Koordinaten der Gleichungen (2.32) hat der Laplace-Operator die Form

$$\Delta = \frac{1}{b^4} \frac{1}{2r} (\Delta_\mu + \Delta_\nu) \quad , \quad (2.35)$$

mit $r = b^2/2 (\mu^2 + \nu^2)$ und den Operatoren

$$\Delta_\rho = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad , \quad \rho \in \{\mu, \nu\} \quad . \quad (2.36)$$



(a) (r, z) -Ebene in Zylinderkoordinaten

(b) Semiparabolische Koordinaten

Abbildung 2.6.: a) Netz aus äquidistanten, parallelen Linien in der (r, z) -Ebene zylinderförmiger Koordinaten (r, ϑ, z) . Die Lage der Linien in diesem Raum wird je horizontal und vertikal in einem unterschiedlichen Farbverlauf symbolisiert. Zur Verdeutlichung der Orientierung im Raum ist je eine Seite einer Linie mit einem Kreis der entsprechenden Farbe markiert. Zusätzlich ist die erste Winkelhalbierende und ihre an der $z = 0$ -Achse Gespiegelte gestrichelt eingezeichnet. b) Darstellung des selben Netzes nach der Transformation in die (μ, ν) -Ebene semiparabolischer Koordinaten. Dabei wird der volle (r, z) -Raum lediglich in den rechten oberen Quadranten abgebildet. Weitere Diskussion siehe Text.

Gleichung (2.31) transformiert sich in diesen Koordinaten zu

$$\left(-\frac{1}{2}(\Delta_\mu + \Delta_\nu) + \frac{1}{2}(\mu^2 + \nu^2) - 2b^2 + \frac{1}{8}b^8 \gamma^2 \mu^2 \nu^2 (\mu^2 + \nu^2) + \frac{1}{2}b^6 f(\mu^4 - \nu^4) \right) \Psi = \left(b^4 E' + \frac{1}{2} \right) (\mu^2 + \nu^2) \Psi \quad . \quad (2.37)$$

Umstellen der ersten beiden Terme führt auf

$$H_0 = H_\mu + H_\nu = \left(-\frac{1}{2}\Delta_\mu + \frac{1}{2}\mu^2 \right) + \left(-\frac{1}{2}\Delta_\nu + \frac{1}{2}\nu^2 \right) \quad . \quad (2.38)$$

Daraus folgt

$$\left(2H_0 - 4b^2 + \frac{1}{4}b^8 \gamma^2 (\mu^4 \nu^2 + \mu^2 \nu^4) + b^6 f(\mu^4 - \nu^4) \right) \Psi = \lambda (\mu^2 + \nu^2) \Psi \quad , \quad (2.39)$$

d. h. ein verallgemeinertes Eigenwertproblem der Form

$$\mathbf{A}(f, \gamma, b) \Psi = \lambda \mathbf{C} \Psi \quad (2.40)$$

mit dem Eigenwert $\lambda = (1 + 2b^4 E')$.

Die Hamiltonoperatoren H_μ und H_ν aus Gleichung (2.38) beschreiben je einen zweidimensionalen harmonischen Oszillator, wobei μ und ν jeweils einer Radialkoordinate in Polarkoordinaten entspricht. Für die Darstellung des Problems in Matrixform sind daher die Eigenzustände $|N_\rho, m\rangle$ ($\rho \in \{\mu, \nu\}$) des zweidimensionalen harmonischen Oszillators eine geeignete Basis. Durch das Auftreten desselben Winkels⁵ φ in den beiden Operatoren H_μ und H_ν tritt in den jeweiligen Basisfunktionen die selbe Drehimpulsquantenzahl m auf, weshalb die Basis des Gesamtsystems durch

$$|N_\mu, N_\nu, m\rangle = |N_\mu, m\rangle \otimes |N_\nu, m\rangle \quad (2.41)$$

gegeben ist. Eine ausführliche Erklärung zum zweidimensionalen harmonischen Oszillator sowie die zur Berechnung der Matrixelemente von \mathbf{A} und \mathbf{C} benötigten Relationen finden sich im Anhang A.

2.3.3. Matrixaufbau und numerische Methoden

Die Basis eines (zweidimensionalen) harmonische Oszillators ist unendlich dimensional, d. h. die Matrix der Basisdarstellung wäre unendlich groß, was numerisch nicht zu realisieren ist. Aus diesem Grund werden nur Zustände bis zu einem endlichen $N = N_\mu + N_\nu$ der Basiszustände $|N_\mu, N_\nu, m\rangle$ berücksichtigt. Dies geschieht unter der Annahme, dass die Darstellung eines Zustandes $|A\rangle$ für große N konvergiert und deshalb die Reihe

$$|A\rangle = \sum_{n_\mu, n_\nu=0}^{N_{\max}} \langle N_\mu, N_\nu, m|A\rangle |N_\mu, N_\nu, m\rangle \quad (2.42)$$

nach einem endlichen N_{\max} abgebrochen werden kann. Entscheidende Auswirkungen auf das Konvergenzverhalten dieser Reihe hat dabei der Konvergenzparameter b der semiparabolischen Koordinaten aus den Gleichungen (2.32).

Beim Aufbau der Matrix werden die Zustände nach gleicher Quantenzahl N sortiert

$$\begin{aligned} N = 0 & : |0, 0, m\rangle \\ N = 1 & : |1, 0, m\rangle, |0, 1, m\rangle \\ N = 2 & : |2, 0, m\rangle, |1, 1, m\rangle, |0, 2, m\rangle \quad \dots \end{aligned}$$

Die Operatoren μ und ν treten in der Summe der Exponenten in Gleichung (2.39) höchstens in Ordnung ρ^6 auf, d. h. sie können die Quantenzahl N nach den Gleichungen (A.31)

⁵Vergleiche Gl. (2.36) und (2.38).

nur um maximal $\Delta N = \pm 3$ ändern. Aufgrund der Orthogonalität der Basiszustände $|N_\mu, N_\mu, m\rangle$ sind entsprechend der Gleichungen (A.31) demnach nur wenige Matrixelemente von Null verschieden, wodurch eine Bandstruktur in den Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{C} entsteht. Diese Bandstruktur zerfällt dabei in Blöcke, welche durch wachsende Quantenzahl N immer größer werden. So besitzt z. B. die Matrix \mathbf{A} für ein gegebenes N_{\max} eine quadratische Form $M \times M$ mit

$$M = \frac{(N_{\max} + 1)(N_{\max} + 2)}{2} \quad (2.43)$$

mit der maximalen Bandbreite $8N_{\max} - 5$. Wird nicht die volle Matrix gespeichert, sondern nur die Einträge in einem Band der maximalen Breite, so reduziert sich der Speicherverbrauch für den im Rahmen dieser Arbeit häufig verwendeten Fall von $N_{\max} = 90$ um rund 83%.

Zur Berechnung der Energieeigenwerte des betrachteten Systems (Exziton in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern) mussten zuerst einmal die entsprechenden Matrizen aus Gleichung (2.39) nach obigem Vorgehen gefüllt werden. Dazu wurde die Programmiersprache *Fortran* verwendet, da mit der dort vorhandenen (und in Ref. [6] erfolgreich getesteten) *ARPACK*-Routine ein Software-Paket zur Verfügung steht, mit welchem die generalisierte Eigenwertgleichung (2.39) für hochdimensionale Bandmatrizen effektiv und schnell gelöst werden kann. Der Lösungsalgorithmus basiert dabei auf der IRAM-Methode (engl. Implicitly Restarted Arnoldi Method) und bietet die Möglichkeit, eine Energie $E_0 \in \mathbb{C}$ und eine gewünschte Anzahl n an Eigenwerten vorgeben zu können, so dass nur die n energetisch am nächsten zu E_0 gelegenen Eigenwerte berechnet werden. So kann einerseits mit einer sehr hohen Zahl von Basiszuständen gerechnet werden (meist wurde $N_{\max} = 90$ verwendet, was nach Gleichung (2.43) zu 4 186 Basiszuständen führt), andererseits bleibt jedoch der numerische Aufwand zur Lösung der Eigenwertgleichung verhältnismäßig klein, sofern nur eine kleine Anzahl von Eigenwerten berechnet wird. Für weitere Informationen zu *ARPACK* und numerische Details, siehe Ref. [15].

Die Lösung der generalisierten Eigenwertgleichung (2.39) im Falle $N_{\max} = 90$ für eine gewünschte Zahl von 20 Eigenwerten auf einem Kreis mit 60 Schritten im Parameterraum (d.h. die Eigenwerte müssen 60 mal berechnet werden) benötigt mit diesem Vorgehen ca. eine Rechendauer von einer Stunde. Da oft viele dieser Rechnungen gleichzeitig ablaufen sollten, wurde das Software-Paket *HTCondor* verwendet. Es bietet die Möglichkeit, jede dieser Rechnungen als eigenen Job auf einem freien CPU-Kern im Cluster des Instituts auszuführen und verwaltet diese Verteilung.

Die Steuerung von *HTCondor*, sowie die Auswertung und weitere Verarbeitung der errechneten Daten benötigt einen vergleichsweise vernachlässigbaren numerischen Aufwand, so dass alle weiteren für diese Arbeit verwendeten Programme in *Python* geschrieben wurden.

2.3.4. Ortsdarstellung einer Wellenfunktion in semiparabolischen Koordinaten

Zur Herleitung der Matrixdarstellung von Gleichung (2.29) in Abschnitt 2.3.2 wird die Transformation auf semiparabolische Koordinaten verwendet. Das Auftreten der Hamiltonoperatoren zweier zweidimensionaler, harmonischer Oszillatoren in der resultierenden Gleichung (2.39) legt nahe, dass deren Basis eine vollständige Darstellung des Problems erlaubt. Die Herleitung der Ortsdarstellung der zu einem Eigenwert gehörigen Wellenfunktion in semiparabolischen Koordinaten geht deshalb ebenfalls von den Eigenfunktionen des zweidimensionalen, harmonischen Oszillators aus. Dieser wird beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_\rho + \frac{1}{2}\rho^2 = (N + 1) \quad , \quad (2.44)$$

wobei $N = (\hat{n}_+ + \hat{n}_-)$ der Besetzungszahloperator der „ \pm -Quanten“ und Δ_ρ der Laplace-Operator aus Gleichung (2.36) ist (eine ausführliche Darstellung der Quantenalgebra des zweidimensionalen harmonischen Oszillators findet sich in Anhang A). Für den Besetzungszahloperator gilt nach Gleichung (2.44)

$$N = H - 1 = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{1}{2\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{2\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{2}\rho^2 - 1 \quad . \quad (2.45)$$

Nach Abschnitt 2.3.2 handelt es sich beim Exziton in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern um ein axial- oder zylindersymmetrisches Problem, der Drehimpuls ist eine gute Quantenzahl. In einer Eigenfunktion $\Psi(\rho, \varphi)$ des zweidimensionalen harmonischen Oszillators kann der Winkel φ deshalb lediglich als eine globale Phase auftreten, weshalb der Ansatz

$$\Psi(\rho, \varphi) = f(\rho) e^{im\varphi} \quad (2.46)$$

für eine solche Eigenfunktion gewählt wird. Dadurch gilt

$$L \Psi(\rho, \varphi) = -i\frac{\partial}{\partial\varphi} \Psi(\rho, \varphi) = m \Psi(\rho, \varphi) \quad (2.47)$$

und der Drehimpulsoperator $L = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$ in Gleichung (2.45) kann durch seine Quantenzahl m ersetzt werden.

Durch Anwendung des Besetzungszahloperator N auf die Eigenfunktion $\Psi(\rho, \varphi)$ muss sich gerade die Besetzungszahl $n = n_+ + n_-$ der „ \pm -Quanten“ ergeben, weshalb

$$N \Psi(\rho, \varphi) = \left\{ -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{1}{2\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{m^2}{2\rho^2} + \frac{1}{2}\rho^2 - 1 \right\} \Psi(\rho, \varphi) \stackrel{!}{=} n \Psi(\rho, \varphi) \quad (2.48)$$

gelten soll. Mit der Form (2.46) folgt

$$\left\{ -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{1}{2\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{m^2}{2\rho^2} + \frac{1}{2}\rho^2 - 1 - n \right\} f(\rho) = 0 \quad . \quad (2.49)$$

Der Ansatz

$$f(\rho) = e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^{|m|} g(\rho) \quad (2.50)$$

für den radialen Anteil führt auf

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + (1 + 2|m| - 2\rho^2) \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + 2(n - |m|) \right\} g(\rho) = 0 \quad (2.51)$$

oder mit Hilfe der Variablensubstitution $u = \rho^2$ auf die LAGUERRESche *Differentialgleichung*⁶

$$\left\{ u \frac{\partial^2}{\partial u^2} + (1 + |m| - u) \frac{\partial}{\partial u} + \frac{1}{2} (n - |m|) \right\} g(u) = 0 \quad . \quad (2.52)$$

Da für das Energiespektrum eines zweidimensionalen, harmonischen Oszillators die Größe $(n - |m|)/2$ ganzzahlig ist (siehe Anhang A) ergeben sich als Lösung die LAGUERRESchen *Polynome*

$$g(u) = L_{\left(\frac{n-|m|}{2}\right)}^{(|m|)}(u) \quad \text{oder} \quad g(\rho) = L_{\left(\frac{n-|m|}{2}\right)}^{(|m|)}(\rho^2) \quad . \quad (2.53)$$

Mit Hilfe der Gleichungen (A.14), (A.15) und (A.22) können anstelle der Basiszustände $|n, m\rangle$ die Basiszustände $|N_\rho, m\rangle$ verwendet werden. Dabei gilt $N_\rho = (n - |m|)/2$ und

$$g(\rho) = L_{(N_\rho)}^{(|m|)}(\rho^2) \quad . \quad (2.54)$$

Für die unnormierte Eigenfunktion folgt demnach

$$\Psi(\rho, \varphi) = e^{-\rho^2/2} \rho^{|m|} L_{(N_\rho)}^{(|m|)}(\rho^2) e^{im\varphi} \quad . \quad (2.55)$$

Die Normierung ergibt sich aus der Bedingung

$$\int_0^\infty d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \rho \Psi^*(\rho, \varphi) \Psi(\rho, \varphi) \stackrel{!}{=} 1 \quad . \quad (2.56)$$

Mit Hilfe der Relation

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha L_{(n)}^{(\alpha)}(x) L_{(m)}^{(\alpha)}(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{falls } m \neq n, \operatorname{Re}(\alpha) > -1 \\ \frac{\Gamma(\alpha+n+1)}{n!} & \text{falls } m = n, \operatorname{Re}(\alpha) > 0 \end{cases} \quad (2.57)$$

nach Ref. [17] und der Beziehung für die Gamma-Funktion [16]

$$\Gamma(N_\rho + |m| + 1) = (N_\rho + |m|)! \quad \text{mit} \quad N_\rho + |m| \in \mathbb{N}_0 \quad (2.58)$$

⁶Bei Beschränkung auf ganzzahlige Parameter ($n = 0, 1, 2, \dots$) und reelle Veränderliche hat die LAGUERRESche *Differentialgleichung* die Form $x y'' + (\alpha + 1 - x) y' + n y = 0$. Als partikuläre Lösungen ergeben sich die LAGUERRESchen *Polynome* $L_{(n)}^{(\alpha)}(x) = \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha})$ [16].

berechnet sich die Darstellung der normierten Eigenfunktion des Zustandes $|N_\rho, m\rangle$ eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators zu

$$\Psi_{N_\rho, m}(\rho, \varphi) = \sqrt{\frac{N_\rho!}{(N_\rho + |m|)!}} \sqrt{\frac{1}{\pi}} e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^{|m|} L_{(N_\rho)}^{(|m|)}(\rho^2) e^{im\varphi} \quad (2.59)$$

für den Raum der semiparabolischen Koordinaten $\rho \in \{\mu, \nu\}$.

Nach Abschnitt 2.3.2 beinhaltet der Hamiltonoperator des Exzitons im parallelen elektrischen und magnetischen Feld in diesem Raum zwei zweidimensionale, harmonische Oszillatoren in μ und ν , welche aufgrund der Symmetrie des Problems den selben Winkel φ und somit die gleiche Drehimpulsquantenzahl m besitzen. Nach Gleichung (2.41) ergeben sich die Basiszustände des gesamten Systems aus einem Produkt der Zustände eines einzelnen, zweidimensionalen harmonischen Oszillators

$$|N_\mu, N_\nu, m\rangle = |N_\mu, m\rangle \otimes |N_\nu, m\rangle \quad . \quad (2.60)$$

Nach Gleichung (2.59) gilt somit für die Ortsdarstellung einer Eigenfunktion $|N_\mu, N_\nu, m\rangle$ des Hamiltonoperators (2.29) im Raum der semiparabolischen Koordinaten

$$\Psi_{N_\mu, N_\nu, m}(\mu, \nu, \varphi) = \sqrt{\frac{N_\mu! N_\nu!}{(N_\mu + |m|)! (N_\nu + |m|)!}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} f_{N_\mu, m}(\mu) f_{N_\nu, m}(\nu) e^{im\varphi} \quad (2.61)$$

mit den beiden Radialteilen

$$f_{N_\rho, m}(\rho) = e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^{|m|} L_{(N_\rho)}^{(|m|)}(\rho^2) \quad \text{mit} \quad \rho \in \{\mu, \nu\} \quad . \quad (2.62)$$

Der Faktor $\sqrt{2}$ entstammt der Tatsache, dass bei der Normierung nur einmal über φ integriert, jedoch zweimal die Ersetzung $u = \rho^2$ mit $du = 2\rho d\rho$ vorgenommen wird. Eine alternative Darstellung dieser Eigenfunktion für die $|n, m\rangle$ -Basis (siehe Anhang A) findet sich in [18].

Zur Berechnung der komplex konjugierten Eigenfunktion $\Psi_{N_\mu, N_\nu, m}^*(\mu, \nu, \varphi)$ wird nur $e^{im\varphi}$ durch $e^{-im\varphi}$ ersetzt, d. h. nur ihr intrinsisch komplexer Anteil. Im Rahmen der komplexen Skalierung werden zwar auch μ und ν zu komplexen Größen, jedoch sind diese Anteile der Eigenfunktion hier nicht zu konjugieren (siehe hierzu Abschnitt 2.1.2).

Wird Gleichung (2.39) durch Diagonalisierung der zugehörigen Matrix gelöst, so ergibt sich zu jedem Energieeigenwert E_i ein Eigenvektor mit den zugehörigen Entwicklungskoeffizienten $c_{i, N_\mu, N_\nu, m}$ der Eigenzustände. Für die Ortsdarstellung der zu diesem Eigenwert E_i gehörenden Wellenfunktion $\Psi_i(\mu, \nu, \varphi)$ im Raum der semiparabolischen Koordinaten gilt

$$\Psi_i(\mu, \nu, \varphi) = \sum_{N_\mu, N_\nu, m} c_{i, N_\mu, N_\nu, m} \Psi_{N_\mu, N_\nu, m}(\mu, \nu, \varphi) \quad , \quad (2.63a)$$

$$\Psi_i^*(\mu, \nu, \varphi) = \sum_{N_\mu, N_\nu, m} c_{i, N_\mu, N_\nu, m} \Psi_{N_\mu, N_\nu, m}^*(\mu, \nu, \varphi) \quad . \quad (2.63b)$$

2. Grundlagen

Nach [18] handelt es sich hierbei um normierte Wellenfunktionen des gekoppelten, zweidimensionalen Oszillators mit der Normierung

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\mu \int_0^\infty d\nu \int_0^{2\pi} d\varphi \mu \nu \Psi_{N_\mu, N_\nu, m}^*(\mu, \nu, \varphi) \Psi_{N'_\mu, N'_\nu, m'}(\mu, \nu, \varphi) \\ = \delta_{N_\mu, N'_\mu} \delta_{N_\nu, N'_\nu} \delta_{m, m'} \quad . \end{aligned} \quad (2.64)$$

Zwei Wellenfunktionen $\Psi_i(\mu, \nu, \varphi)$ und $\Psi_j(\mu, \nu, \varphi)$ zu den Eigenwerten E_i und E_j sind nicht orthonormal. Sie lassen sich jedoch durch

$$\begin{aligned} \int d^3r \Psi_i^*(\mu, \nu, \varphi) \Psi_j(\mu, \nu, \varphi) = \\ b^6 \int_0^\infty d\mu \int_0^\infty d\nu \int_0^{2\pi} d\varphi \mu \nu (\mu^2 + \nu^2) \Psi_i^* \Psi_j = \delta_{i,j} \end{aligned} \quad (2.65)$$

normieren.

Eine weitere Besonderheit dieser Wellenfunktionen ergibt sich bei der Betrachtung der Größe $\Psi_i^* \Psi_i$. Da die komplexe Konjugation nach Abschnitt 2.1.2 nur für intrinsisch komplexe Anteile der Wellenfunktion gilt, wird diese Größe bei der Betrachtung von Resonanzen mit endlicher Lebensdauer durch die komplexe Rotation ebenfalls komplex und kann nicht mehr als Aufenthaltswahrscheinlichkeit interpretiert werden. Als neue Größe für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit wird deshalb im Folgenden nach Ref. [19] $|\Psi_i^* \Psi_i|$ verwendet.

3. Nachweis exzeptioneller Punkte bei Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern

Ausgangspunkt für die Suche nach exzeptionellen Punkten im Exziton in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern nach dem wasserstoffartigen Modell ist die Vermutung in Ref. [6], dass das Auftreten von vermiedenen Kreuzungen im Energiespektrum eines Exzitons zu einem exzeptionellen Punkt der beiden an der vermiedenen Kreuzung beteiligten Resonanzen führt. Aus diesem Grund musste zuerst einmal ein grober Parameterbereich für das Verhältnis von elektrischer zu magnetischer Feldstärke (γ/f) abgeschätzt werden, in welchem diese vermiedenen Kreuzungen beobachtet werden können.

3.1. Resonanzen und vermiedene Kreuzungen

Zur Suche nach vermiedenen Kreuzungen im Spektrum eines Exzitons in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern wurde die Eigenwertgleichung (2.39) für verschiedene Parameter (γ, f) mit konstantem Verhältnis γ/f gelöst. Für jede Kombination (γ, f) wurden dabei drei Rechnungen durchgeführt, wobei jeweils die Phase α des Konvergenzparameters $b = b_0 \exp(i\alpha)$ der semiparabolischen Koordinaten (Gleichung (2.32)) variiert wurde. Nach Abschnitt 2.1.2 führt dies zu einer komplexen Rotation.

Wie in Kapitel 2.1.3 beschrieben, ändert sich bei einer solchen Rotation nur die Lage der Streuzustände in der komplexen Energieebene, die Lage der gebundenen Zustände und der Resonanzen bleibt hingegen gleich. Diese Tatsache lässt sich ausnutzen, um aus den berechneten Energieeigenwerten für eine Kombination (γ, f) die gebundenen Zustände und auskonvergierten Resonanzen heraus zu filtern. Dabei werden die Eigenwerte dreier verschiedener Rechnungen mit unterschiedlichem Winkel α miteinander verglichen und nur solche Werte herausgeschrieben, die ihre spektrale Lage nicht mehr, als eine gewisse numerischen Toleranz geändert haben. Alle Streuzustände, die für jeden Winkel α an einem anderen Punkt in der komplexen Energieebene auftauchen, fallen dadurch heraus. Eine beispielhafte Darstellung zweier konvergierter Resonanzen, sowie einer schlecht konvergierter Resonanz zusammen mit winkelabhängigen Streuzuständen ist in Abbildung 3.1 zu sehen.

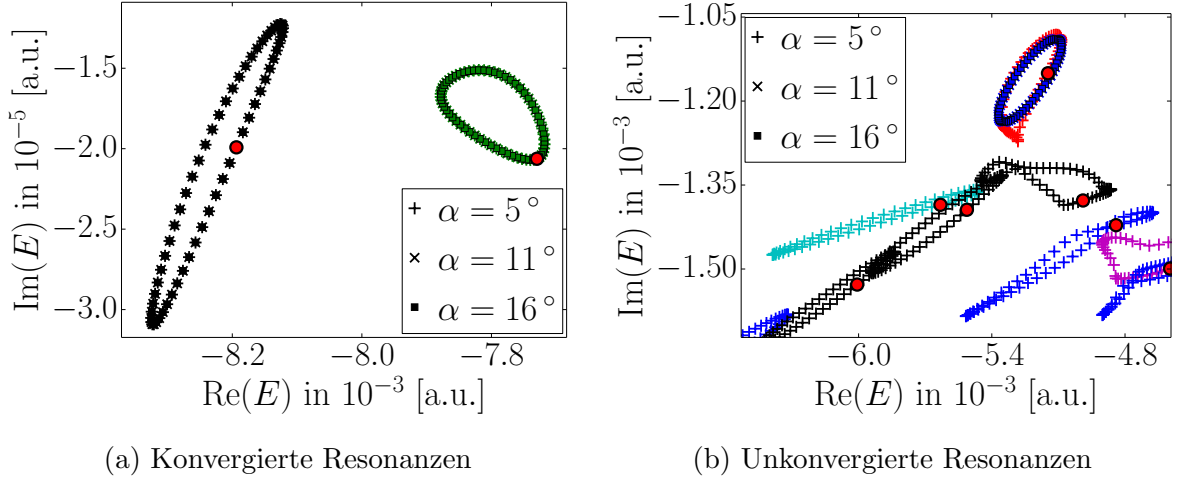


Abbildung 3.1.: a) Konvergierte Resonanzen für eine Basis von $N_{\max} = 90$. Im Parameterraum wurde dabei ein Ellipse in 60 Schritten um den Punkt ($\gamma = 2,17 \cdot 10^{-3}$, $f = 2,17 \cdot 10^{-5}$) mit den relativen Ellipsenradien von 3% zum absoluten Wert von je f und γ umlaufen. Die Trajektorien der berechneten Energieeigenwerte stimmen für alle drei Konvergenzwinkel α überein. Die Startpunkte sind durch einen roten Kreis markiert. b) Die Resonanzen im oberen Bereich der Abbildung sind schlecht konvergiert. Die Trajektorie für $\alpha = 5^\circ$ (markiert durch rote +) weicht deutlich von den anderen beiden ab. Im unteren Bereich tauchen nicht konvergierte Streuzustände auf. Da ihre Lage im Diagramm winkelabhängig ist, werden sie für andere Konvergenzwinkel α aus dem Sichtbereich des Diagramms verschoben.

Die reellen Energien der auskonvergierten Resonanzen und die Energien der gebundenen Zustände können nun über f aufgetragen werden ($\gamma = c f$ ist durch das konstant gehaltene Verhältnis $c = \gamma/f$ ebenfalls festgelegt), um das so entstehende Spektrum auf vermiedene Kreuzungen untersuchen zu können.

Abbildung 3.2 wurde mit $N_{\max} = 90$ und einem Verhältnis von $\gamma/f = 120$ berechnet. Sie zeigt einige vermiedene Kreuzungen, welche mit roten Kreisen markiert wurden. An einer vermiedenen Kreuzung kommen sich zwei Zustände sehr nahe, sie kreuzen sich jedoch nicht, sondern weichen einander aufgrund ihrer Wechselwirkung aus [4]. Hier von ausgehend lässt sich nun untersuchen, ob bei einer Variation der Feldstärken eine Entartung im Sinne eines EP auftritt.

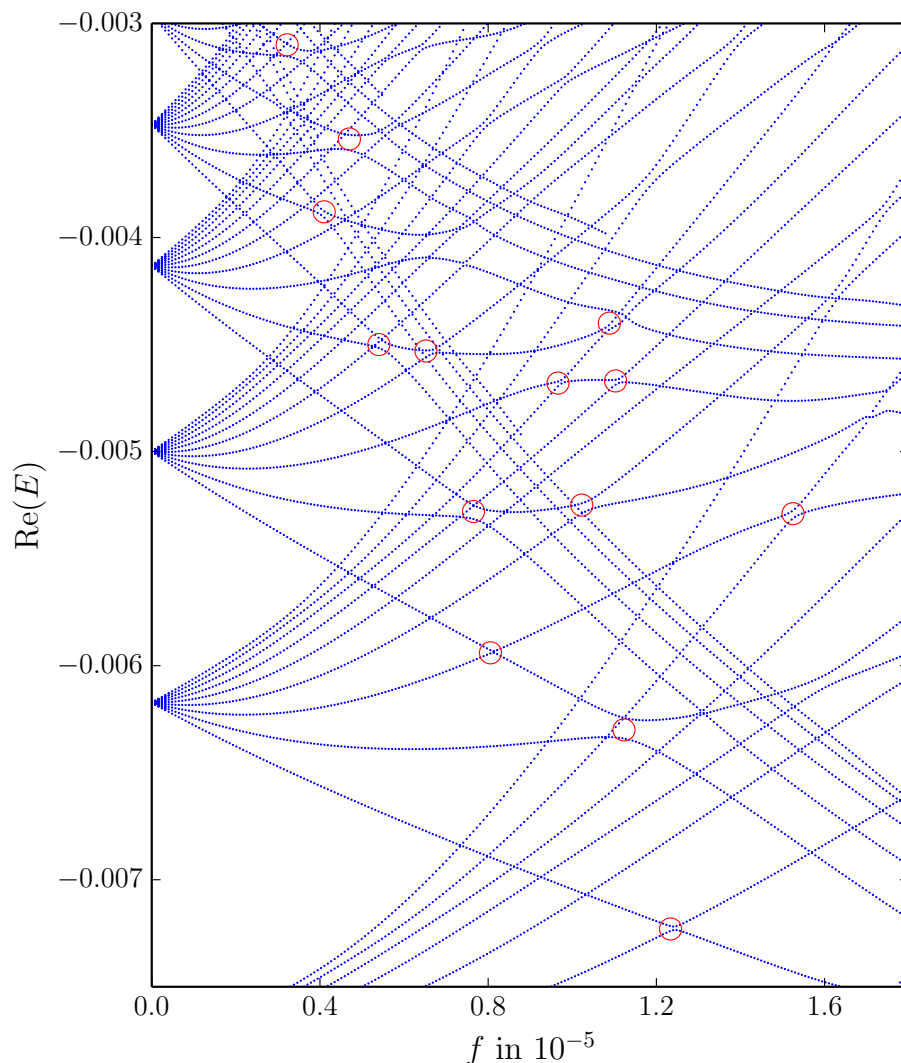


Abbildung 3.2.: Auftragung des Realteils der Energie auskonvergierter Resonanzen und gebundener Zustände über der elektrischen Feldstärke f bei einem Verhältnis von $\gamma/f = 120$ und einer Basis mit $N_{\max} = 90$. Einige der auftretenden vermiedenen Kreuzungen sind mit einem roten Kreis markiert und wurden im Rahmen dieser Arbeit auf das Auftreten exzeptioneller Punkte untersucht. Im Falle von atomarem Wasserstoff entspricht $f = 1,6 \cdot 10^{-5}$ einer elektrischen Feldstärke von $8,22 \cdot 10^6$ V/m und $\gamma = 120f$ einer magnetischen Flussdichte von 451 T (siehe Anhang B). Diese Werte sind experimentell nach aktuellem Stand nicht zugänglich. Für Cu_2O ergibt sich hierfür entsprechend jedoch eine elektrische Feldstärke von $2,82 \cdot 10^3$ V/m und eine magnetische Flussdichte von 1,16 T, beides Werte, die sich ohne größere Probleme experimentell realisieren lassen. Das gezeigte Schaubild befindet sich für Cu_2O demnach im experimentell zugänglichen Bereich.

3.2. Vertauschungsverhalten der Eigenwerte eines EP

Bei der Suche nach einem exzeptionellen Punkt, ausgehend von einer vermiedenen Kreuzung, wurde zuerst deren Lage im (γ, f) -Raum lokalisiert und ihre Energie E_0 notiert. Anschließend wurde an der (γ, f) -Kombination einer solchen Kreuzung eine Ellipse mit 60 Schritten und einem Radius von 2% des absoluten Wertes in je γ und f berechnet und für jeden Punkt auf dieser Ellipse die generalisierte Eigenwertgleichung (2.39) gelöst. Dabei wurden je 50 – 100 Eigenwerte um die Energie E_0 der vermiedenen Kreuzung berechnet.

Das so entstehende Eigenwertspektrum in der komplexen Ebene kann anschließend auf die Signatur vertauschender Eigenwerte wie z. B. in Abbildung 2.5 untersucht werden. Dazu wird ein selbst geschriebenes *Python*-Skript verwendet, welches die Eigenwerte sortiert, um eine verschiedenfarbige Darstellung der Pfade im Energieraum zu gewährleisten. Diese Sortierung ist nötig, da nicht alle verfügbaren Eigenwerte der Basis berechnet werden, sondern nur eine kleine Anzahl von Werten, die energetisch am nächsten an der Energie E_0 der vermiedenen Kreuzung liegt. Läuft einer dieser Eigenwerte für verschiedene Punkte auf der Ellipse im Parameterraum aus dem „sichtbaren“ Energiefenster, weil sich an einer anderen Stelle in der komplexen Energieebene ein weiterer Eigenwert in Richtung E_0 bewegt, so ändert sich die Reihenfolge aller berechneten Eigenwerte. Ein Wert, der die ersten zehn Ellipsenschritte an Position x der berechneten Eigenwerte stand, kann dadurch an eine andere Position $y \neq x$ rücken. Nur wenn der gleiche Eigenwert immer die selbe Position, relativ zu allen berechneten Eigenwerten, besitzt, können die Pfade der Eigenwerte im Schaubild nach dieser Position farblich sortiert dargestellt werden. Die Sortierung verläuft dabei wie folgt:

1. Für den ersten Punkt auf der Ellipse im Parameterraum (γ, f) werden alle n Eigenwerte berechnet, welche am nächsten zur gewünschten Energie E_0 liegen. Die Position dieser ersten Eigenwerte legt die Reihenfolge der Sortierung fest.
2. Dieses Verfahren wird für den zweiten Punkt auf der Ellipse unter der Annahme wiederholt, dass die Schritte auf der Ellipse klein genug gewählt sind, sodass noch kein Eigenwert aus dem Energiefenster läuft und sich die Reihenfolge der Eigenwerte bei diesem Schritt noch nicht ändert.
3. Für alle folgenden Schritte auf der Ellipse wird mit Hilfe der jeweils berechneten (und sortierten) Energieeigenwerte der vorherigen beiden Schritte eine lineare Interpolation zu einem Punkt E_{guess} durchgeführt. Anschließend werden alle berechneten Eigenwerte des aktuellen Schrittes mit jedem E_{guess} verglichen und an diejenige Position sortiert, bei welcher die Differenz der Beträge von aktuellem Eigenwert und E_{guess} minimal wird. Durch dieses Vorgehen wird eine Sortierung der Eigenwerte gewährleistet.

4. Nach einem vollständigen Umlauf auf der Ellipse können nun die Anfangs- und Endwerte der selben Position verglichen werden. Unterscheiden sich beide Positionen im Rahmen einer numerischen Toleranz nicht, so handelt es sich bei dem Eigenwert um einen einfachen gebundenen Zustand oder eine einfache Resonanz. Gibt es jedoch einen deutlichen Unterschied zwischen Start- und Endwert, so liegt das Vertauschungsverhalten der Resonanzen eines exzeptionellen Punktes vor.
5. Die Verdachtsfälle aus dem letzten Schritt sollten durch eine graphische Darstellung in einem Schaubild überprüft werden, bei welcher alle Energieeigenwerte des ersten Schritts auf der Ellipse gesondert markiert werden (z.B. durch einen roten Punkt). Werden zwei dieser Punkte durch Wege unterschiedlicher Farbe miteinander verbunden, so handelt es sich um die vertauschenden Resonanzen eines exzeptionellen Punktes. Ändert sich jedoch auf einem Weg zwischen zwei Punkten die Farbe oder zeigt ein einzelner Weg mehrere Farben, so handelt es sich hier um ein Artefakt der Farbgebung bzw. ein Fehler in der Sortierung. Diese Artefakte treten vor allem bei größeren Energiedifferenzen zu E_0 auf oder wenn viele Resonanzpfade ineinander laufen. Sie können verringert werden, indem eine kleinere Schrittweite (d. h. mehr Punkte) auf der Ellipse gewählt wird.

Abbildung 3.3a zeigt einen beispielhaften Umlauf auf einer Ellipse mit 200 Schritten im Parameterraum um $(f = 2,735 \cdot 10^{-5}, \gamma = 2,426 \cdot 10^{-3})$ mit relativen Ellipsenradien von 2% des absoluten Wertes von je f und γ . Die für jeden dieser Schritte berechneten Energieeigenwerte sind nach obigem Vorgehen farblich sortiert in Abbildung 3.3b dargestellt. Sie zeigen die charakteristische Signatur eines exzeptionellen Punktes. Bei einem vollen Umlauf im Parameterraum vertauschen die beiden Resonanzen ihre Position, der EP befindet sich somit innerhalb der Ellipse im Parameterraum. In dieser Abbildung wird die Notwendigkeit der farblichen Sortierung deutlich. Ohne diese wäre nicht zu unterscheiden, ob die Resonanzen tatsächlich ihre Position vertauschen oder zwei sich berührende Schleifen bilden.

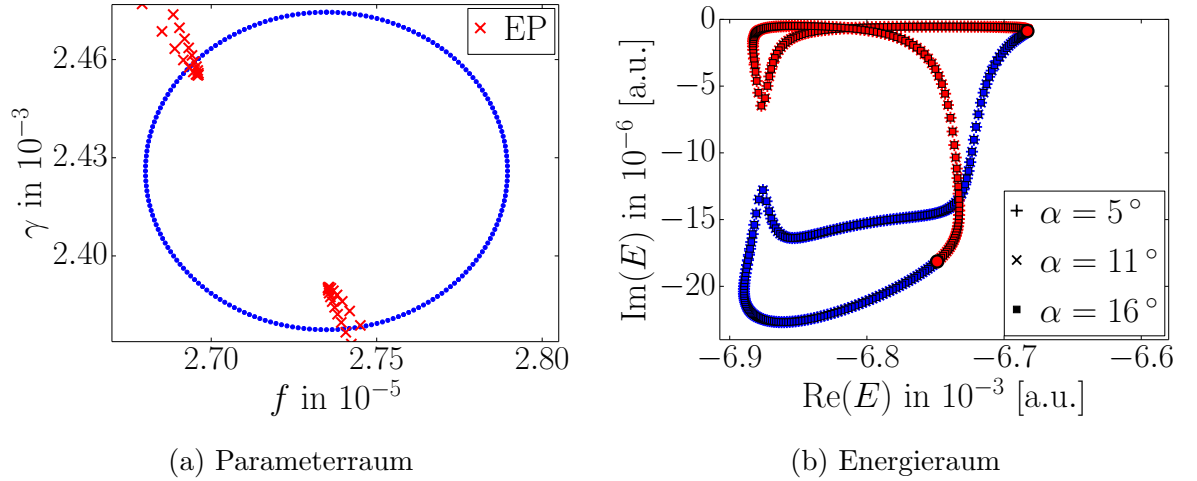


Abbildung 3.3.: a) Umlauf auf einer Ellipse mit 200 Schritten im Parameterraum um $(\gamma = 2,426 \cdot 10^{-3}, f = 2,735 \cdot 10^{-5})$ mit den relativen Ellipsenradien von 2% des absoluten Wertes von je f und γ . Durch rote \times markiert sind die vermutlichen Positionen des exceptionellen Punktes, berechnet durch die später noch vorgestellte Dreipunktmethode für Kombinationen jeweils dreier Punkte auf der blauen Ellipse (siehe Abschnitt 4.2). Sie zeigen in diesem Fall jedoch noch keine Konvergenz auf ein bestimmtes Gebiet, sondern besitzen die Form einer Hyperbel. b) Berechnete und farblich sortierte Eigenwerte für jeden dieser Schritte. Die beiden Resonanzen sind gut auskonvergiert (zeigen keine Abhängigkeit vom Rotationswinkel) und vertauschen ihre Position bei einem vollem Umlauf im Parameterraum. Der Nachweis eines EP innerhalb der Ellipse im Parameterraum ist somit erbracht.

4. Bestimmung der exakten Position eines EP im Parameterraum

Durch das in Abschnitt 3.2 präsentierte Vorgehen kann die Signatur eines exzeptionellen Punktes im Eigenwertspektrum nachgewiesen werden. Dabei wird jedoch lediglich ein Rückschluss gezogen, ob sich ein EP in der Ellipse befindet oder nicht. Seine genaue Lage in Parameter- und Energieraum bleibt unbekannt.

Ein Ziel dieser Arbeit ist die exakte Bestimmung der Positionen (γ_{EP}, f_{EP}) sowie der Energien E_{EP} exzeptioneller Punkte, wofür iterative Verfahren ähnlich einem Newtonverfahren benötigt werden. Die hierfür grundlegenden Überlegungen sowie zwei dieser Verfahren sind in den folgenden Kapiteln dargestellt.

4.1. Das Matrixmodell – Beschreibung eines EP

Ein exzeptioneller Punkt besteht aus zwei Zuständen mit bestimmten Eigenschaften (siehe Abschnitt 2.2.1). Zur Beschreibung eines solchen Systems aus zwei Eigenwerten und zwei Eigenvektoren, bietet sich ein zweidimensionales Matrixmodell an (siehe hierzu z. B. Ref. [4])

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} a_0 + a_\gamma (\gamma - \gamma_0) + a_f (f - f_0) & b_0 + b_\gamma (\gamma - \gamma_0) + b_f (f - f_0) \\ b_0 + b_\gamma (\gamma - \gamma_0) + b_f (f - f_0) & c_0 + c_\gamma (\gamma - \gamma_0) + c_f (f - f_0) \end{pmatrix} . \quad (4.1)$$

Die Einträge dieser Matrix werden durch lineare Entwicklungen in den beiden reellen Feldstärken γ und f um einen Entwicklungspunkt (γ_0, f_0) mit komplexen Koeffizienten dargestellt. Dadurch wird der Einfluss der externen Felder auf das System in einer kleinen Umgebung um (γ_0, f_0) berücksichtigt. Die beiden Nebendiagonalelemente sind gleich, wodurch das zweidimensionale Matrixmodell die komplex-symmetrische Struktur der Matrix des gesamten Systems aus Abschnitt 2.3.3 beibehält. Durch diesen zweidimensionalen Ansatz werden nur die beiden am EP beteiligten Zustände berücksichtigt und jegliche Kopplungen an weitere Zustände vernachlässigt.

Für die Eigenwerte E_i mit $i \in \{1,2\}$ des 2D-Modells gilt

$$\kappa \equiv E_1 + E_2 = \text{tr}(\mathbf{M}) = A + B (\gamma - \gamma_0) + C (f - f_0) , \quad (4.2a)$$

$$\eta \equiv (E_1 - E_2)^2 = \text{tr}^2(\mathbf{M}) - 4 \det(\mathbf{M}) = D + E (\gamma - \gamma_0) + F (f - f_0) + G (\gamma - \gamma_0)^2 + H (\gamma - \gamma_0) (f - f_0) + I (f - f_0)^2 \quad (4.2b)$$

mit neuen, komplexen Koeffizienten $A, B, C, D, E, F, G, H, I$.

4.2. Lineare Ordnung – Dreipunktmethode

Ein erster Algorithmus zur Berechnung der exakten Position eines EP im Parameterraum ergibt sich durch die lineare Näherung von Gleichung (4.2b)

$$\begin{aligned} \eta = & D + E(\gamma - \gamma_0) + F(f - f_0) \\ & + \mathcal{O}((\gamma - \gamma_0)^2, (f - f_0)^2, (\gamma - \gamma_0)(f - f_0)) \quad . \end{aligned} \quad (4.3)$$

Die quadratische Differenz der Eigenwerte des 2D-Matrixmodells wird demnach linear in den beiden externen Feldern γ und f um einen Entwicklungspunkt (γ_0, f_0) beschrieben. Hierdurch lässt sich ein iterativer Algorithmus zur Berechnung der exakten Position eines EP entwickeln. Er basiert darauf, dass der Entwicklungspunkt an einer beliebigen Stelle gewählt werden kann, insbesondere am EP bei $(\gamma_0 = \gamma_{\text{EP}}, f_0 = f_{\text{EP}})$. Die hieraus resultierende *Dreipunktmethode* wurde im Jahre 2010 von Uzdin und Lefebvre vorgestellt [7].

Die Dreipunktmethode funktioniert in Systemen mit isolierten exzeptionellen Punkten und konvergiert iterativ gegen die tatsächliche Position des exzeptionellen Punktes, sofern der Startpunkt der Suche nahe genug an der eigentlichen Position $(\gamma_{\text{EP}}, f_{\text{EP}})$ gewählt wurde. Ausgangspunkt ist die Entwicklung (4.3) am EP (mit $D = 0$)

$$\eta = E(\gamma - \gamma_{\text{EP}}) + F(f - f_{\text{EP}}) \quad , \quad (4.4)$$

wobei angenommen wird, dass das System durch passende Koeffizienten E, F an einer Position (γ, f) in der Nähe eines EP bei $(\gamma_{\text{EP}}, f_{\text{EP}})$ durch Gleichung (4.4) lokal hinreichend gut beschrieben werden kann. Die tatsächliche Position $(\gamma_{\text{EP}}, f_{\text{EP}})$ des EP ist dabei zunächst nicht bekannt. Der Koeffizient D aus Gleichung (4.3) wurde in Gleichung (4.4) zu Null gesetzt, da diese auch am EP gelten soll, d. h. an der Stelle, an der sowohl η , als auch die Terme mit E und F verschwinden.

Bei der Dreipunktmethode werden zuerst Paare $E_{1,i}$ und $E_{2,i}$ der beiden zum EP gehörenden Eigenwerten an drei verschiedenen Stellen $(\gamma_i, f_i), i \in \{1, 2, 3\}$ im Parameterraum berechnet. Im Falle der vorliegenden Arbeit sind das drei möglichst weit auseinander liegende Punkte (γ_i, f_i) auf einer Ellipse im Parameterraum. Die Entwicklung (4.4) gilt dabei für jeden dieser Punkte. Mit $\eta_i \equiv (E_{1,i} - E_{2,i})^2$ und durch Subtraktion der entsprechenden Gleichung (4.4) am ersten Punkt von derjenigen des zweiten Punktes, bzw. im zweiten Fall von derjenigen des dritten Punktes ergibt sich

$$\eta_2 - \eta_1 = E(\gamma_2 - \gamma_1) + F(f_2 - f_1) \quad , \quad (4.5a)$$

$$\eta_3 - \eta_1 = E(\gamma_3 - \gamma_1) + F(f_3 - f_1) \quad , \quad (4.5b)$$

d. h. ein lineares Gleichungssystem, dessen Lösung auf die Koeffizienten E und F führt. Um eine Vermutung für die Position des exzeptionellen Punktes $(\gamma_{\text{EP}}, f_{\text{EP}})$ zu errechnen, können diese Koeffizienten in die Gleichung (4.4) für einen bestimmten Punkt (z. B.

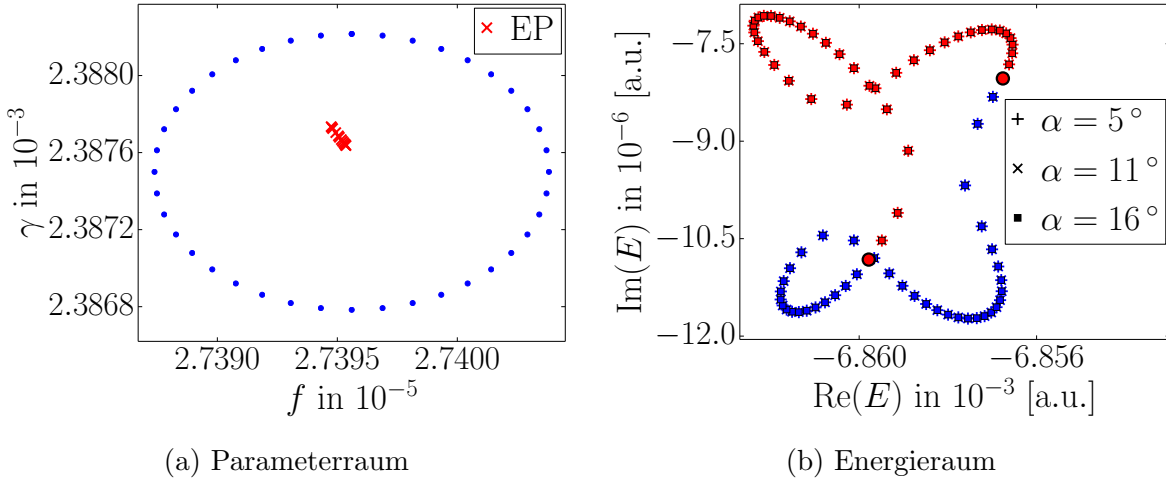


Abbildung 4.1.: a) Umlauf auf einer Ellipse mit 40 Schritten im Parameterraum um ($\gamma = 2,38750 \cdot 10^{-3}$, $f = 2,73956 \cdot 10^{-5}$) mit relativen Ellipsenradien von 0,03% des absoluten Wertes in je f und γ . Durch rote \times markiert sind die vermutlichen Positionen exzeptioneller Punkte, berechnet durch die in Abschnitt 4.2 vorgestellte Dreipunktmethode für Kombinationen von je drei Ellipsenpunkten. Die Methode beginnt zu konvergieren, alle vermutlichen Positionen für (γ_{EP}, f_{EP}) liegen innerhalb der ersten, großen Ellipse (blaue Punkte). b) Berechnete und farblich sortierte Eigenwerte. Durch die Konvergenz hin zur tatsächlichen Position des EP verändert sich die Form der Kurven im Gegensatz zu Abbildung 3.3b hin zu einer Sternform, wie sie im Beispiel 2.5b errechnet wurde. Das EP-typische Vertauschungsverhalten bleibt auch hier sichtbar.

den ersten Punkt) eingesetzt werden. Aus Real- und Imaginärteil dieser Gleichung kann wieder ein lineares Gleichungssystem konstruiert werden

$$\begin{pmatrix} \operatorname{Re}(E) & \operatorname{Re}(F) \\ \operatorname{Im}(E) & \operatorname{Im}(F) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{EP} \\ f_{EP} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}, \quad (4.6a)$$

$$d_1 = \operatorname{Re}(E) \gamma_1 + \operatorname{Re}(F) f_1 - \operatorname{Re}(\eta_1), \quad (4.6b)$$

$$d_2 = \operatorname{Im}(E) \gamma_1 + \operatorname{Im}(F) f_1 - \operatorname{Im}(\eta_1). \quad (4.6c)$$

Die Lösung dieses linearen Gleichungssystems ergibt eine Näherung für die wirkliche Position (γ_{EP}, f_{EP}) des exzeptionellen Punktes.

Abbildung 4.1 zeigt im Gegensatz zu Abbildung 3.3 denjenigen Schritt der Dreipunktmethode, bei welchem deren Konvergenz einsetzt. Betrachtet wird dabei eine Ellipse im Parameterraum (blaue Punkte) mit relativen Radien von 0,03% in γ und f . Die vermutlichen Positionen für (γ_{EP}, f_{EP}) sind durch rote \times markiert.

Wird die Rechnung für mehrere Kombinationen dreier Punkte einer Ellipse im Parameterraum durchgeführt, so liegen die vermutlichen Positionen des exzeptionellen Punktes

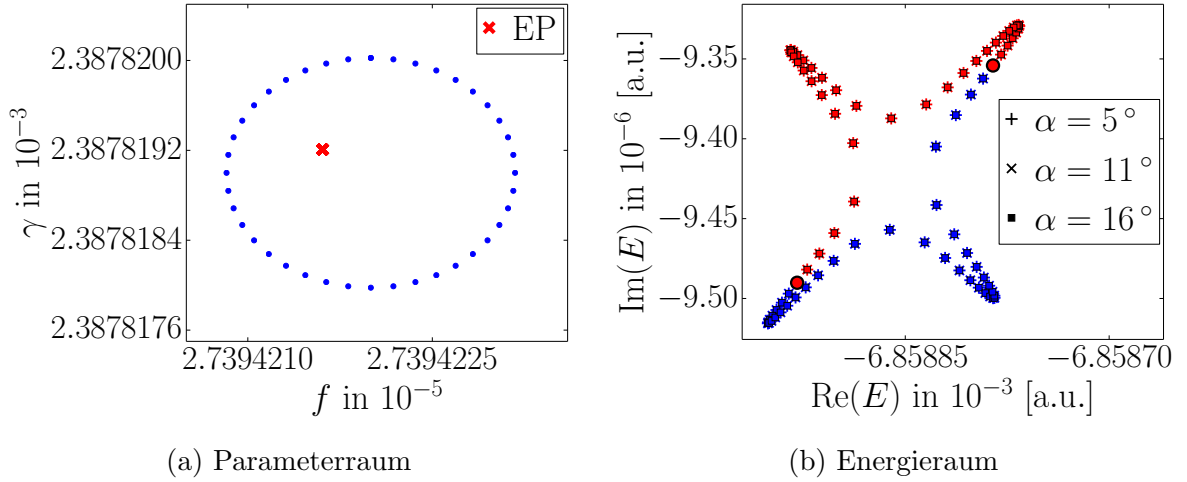


Abbildung 4.2.: a) Umlauf auf einer Ellipse mit 40 Schritten im Parameterraum mit relativen Ellipsenradien von $4,28 \cdot 10^{-5} \%$ des absoluten Wertes von je f und γ . Durch rote \times markiert ist die Position des exzeptionellen Punktes, berechnet durch die in Abschnitt 4.2 vorgestellte Dreipunktmethode. b) Berechnete und farblich sortierte Eigenwerte. Durch den sehr kleinen Umlauf um den exzeptionellen Punkt ist dieser vom System nahezu vollständig isoliert und die Kurve zeigt die selbe Sternform wie in Abbildung 2.5b.

wiederum auf Ellipsen (in Abbildung 4.1a allerdings nicht zu erkennen, da die Ellipse hier sehr flach ist), sofern sich die ursprüngliche Ellipse (blaue \cdot in Abbildung 4.1a) schon nahe genug am EP befindet und ihre relativen Radien in γ und f klein genug gewählt wurden. Die Größe der neuen Ellipse dient als Fehlerabschätzung der errechneten Position des EP.

Das Gebiet dieser neuen Ellipse sollte bei Konvergenz der Dreipunktmethode kleiner als die ursprüngliche Ellipse sein. Im nächsten Iterationsschritt kann dann eine Ellipse mit kleinerem Radius und Mittelpunkt an der vermutlichen Position (γ_{EP}, f_{EP}) gewählt werden – der Algorithmus konvergiert Schritt für Schritt gegen die wirkliche Position des EP.

Ausgehend von Abbildung 4.1 folgt mit zwei weiteren Iterationsschritten der Dreipunktmethode für die Position des betrachteten EP

$$\gamma_{EP} = 2,387\,819 \cdot 10^{-3}, \quad f_{EP} = 2,739\,422 \cdot 10^{-5} \quad . \quad (4.7)$$

Eine Darstellung von Parameterraum und Energieraum beim letzten Iterationsschritt findet sich in Abbildung 4.2. Deutlich ist zu erkennen, wie sich die Pfade der Eigenwerte im Energieraum (im Gegensatz zu Abbildung 4.1) der theoretischen Sternform eines isolierten exzeptionellen Punktes aus Abbildung 2.5b angenähert haben.

4.2.1. Probleme der Dreipunktmethode

Eine Schwierigkeit der in Abschnitt 4.2 vorgestellten Dreipunktmethode besteht darin, dass sie vom sichtbaren Vertauschungsverhalten der beteiligten Eigenwerte bei vollständiger Umkreisung des exzeptionellen Punktes im Parameterraum ausgeht. Beginnend mit den Parametern (γ, f) sowie der Energie einer vermiedenen Kreuzung wurde hierzu typischerweise auf einer Ellipse im Parameterraum mit relativen Radien von 2% in γ und f für 60 Schritte die Eigenwertgleichung gelöst. Meistens war das Vertauschungsverhalten dann jedoch noch nicht sichtbar, d.h. der EP befand sich nicht im umlaufenen Gebiet. Durch eine schrittweise Erhöhung des Radius konnte nun das abgesuchte Gebiet vergrößert werden. Da bei einem größeren Radius im Parameterraum auch das Gebiet wächst, welches von den Pfaden der zugehörigen Eigenwerte im Energieraum durchlaufen wird, beginnen diese Pfade für nahe beieinander liegende Resonanzen ineinander zu laufen und die farbliche Sortierung versagt.

Um die korrekte farbliche Sortierung der Pfade gewährleisten zu können, muss aus diesem Grund die Anzahl der Berechnungsschritte auf dem Pfad im Parameterraum erhöht werden. Typischerweise konnten so die relativen Radien der Ellipse im Parameterraum von 3% auf 10% des absoluten Wertes von γ_0 und f_0 vergrößert werden, wobei sich 200 Schritte als meist ausreichend herausgestellt haben. Je mehr Schritte gewählt werden, desto höher ist jedoch der numerische Aufwand des Verfahrens, sodass solche Berechnungen sehr zeitintensiv sind.

Die schrittweise Vergrößerung des Radius führt auf ein weiteres Problem. Falls der relative Radius der ursprünglichen Ellipse im Parameterraum (vgl. blaue Punkte in Abbildung 3.3a) zu groß ist (und ihre Punkte daher einen zu großen Abstand zum EP besitzen), konvergiert die Dreipunktmethode nicht mehr, die lokale Beschreibung durch die Koeffizienten des zweidimensionalen Matrixmodells versagt. Die Ellipsen im Parameterraum für die vermutliche Position des EP verändern sich dann zu einem hyperbelförmigen Aussehen und verlaufen teilweise außerhalb der ursprünglichen Ellipse (vgl. rote \times in Abbildung 3.3a). Da jedoch die tatsächliche Position des EP innerhalb der ursprünglichen Ellipse sein muss (bestätigt durch sichtbares Vertauschungsverhalten der Eigenwerte), ist diese Vorhersage physikalisch nicht mehr sinnvoll. In diesem Fall kann durch die Dreipunktmethode keine Aussage über die vermutliche Position des EP getroffen werden. Es werden andere Methoden benötigt, um erst einmal nahe genug an die tatsächliche Position des exzeptionellen Punktes zu kommen, sodass die Dreipunktmethode zu konvergieren beginnt.

Eine Möglichkeit zur Annäherung an die tatsächliche Position des EP, falls die Dreipunktmethode noch nicht konvergiert, nutzt die Unterteilung der ursprünglichen Ellipse im Parameterraum in 8×8 kleinere, sich überlappende Ellipsen. Der Überlapp ist so gewählt, dass jeder Punkt der Fläche der großen Ellipse von einer kleinen Ellipse abgedeckt wird. Nun wird die Eigenwertgleichung für jede der kleinen Ellipsen gelöst und diejenige ausgewählt, in welcher sich nun der exzeptionelle Punkt befindet, d. h. bei welcher das typische Vertauschungsverhalten der Eigenwerte betrachtet wird. Anschließend

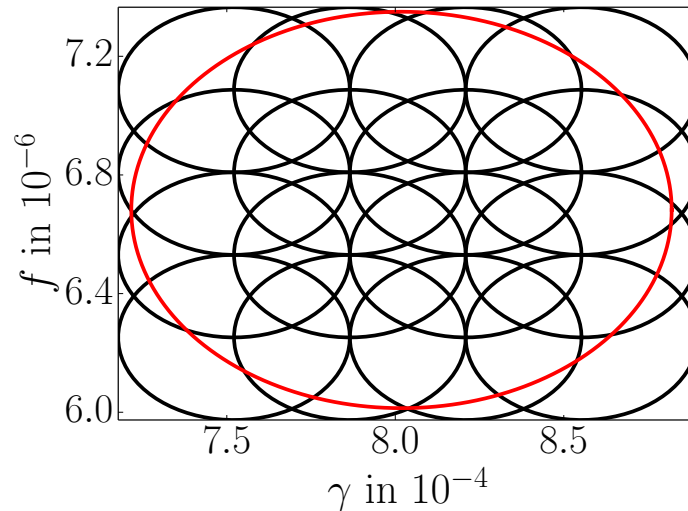


Abbildung 4.3.: Die große, rote Ellipse beschreibt einen geschlossenen Pfad im Parameterraum, bei welchem im Energieraum das Vertauschungsverhalten eines exzeptionellen Punktes beobachtet wurde. Da die Dreipunktmethode hier jedoch noch keine Konvergenz zeigt, muss das Suchgebiet eingeschränkt werden. Dazu wurde in diesem Beispiel die große Ellipse in 4×4 kleinere Ellipsen unterteilt, wobei auf jeder der kleineren Ellipsen die Eigenwertgleichung für eine bestimmte Anzahl von Eigenwerten und Schritten gelöst wird. Anschließend kann jede der kleinen Ellipsen auf vertauschende Eigenwerte untersucht werden. Tritt das Vertauschungsverhalten gleicher Eigenwerte in mehreren Ellipsen gleichzeitig auf, so liegt der EP im Überlappbereich der beteiligten Ellipsen.

wird die Konvergenz der Dreipunktmethode überprüft. Sofern diese noch nicht vorliegt, ist die Unterteilung in 8×8 kleinere Ellipsen zu wiederholen. Eine Veranschaulichung der Aufteilung in kleinere Ellipsen ist in Abbildung 4.3 dargestellt. Der Übersichtlichkeit halber wurde hier lediglich in 4×4 Ellipsen unterteilt.

Die Aufteilung in kleinere Ellipsen kostet sehr viel Rechenzeit, da jede Ellipse wiederum in einer bestimmten Anzahl von Schritten durchlaufen werden muss (je nach Radius typischerweise 40 bis 80 Schritte) und für jeden dieser Schritte die Eigenwertgleichung für eine gewünschte Anzahl von Eigenwerten zu lösen ist. Als Beispiel konnte durch die Unterteilung in kleinere Ellipsen der relative Radius der Ellipse im Parameterraum von anfänglich 2% in Abbildung 3.3 auf 0,03% in Abbildung 4.1 in zwei Schritten reduziert werden. Hier zeigt die Dreipunktmethode erstmalig ein konvergentes Verhalten.

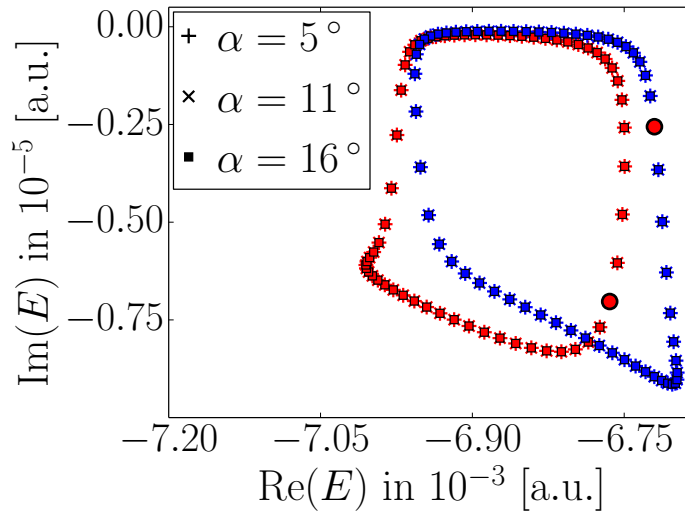


Abbildung 4.4.: Auftragung der komplexen Energie zweier Resonanzen bei einer Umkreisung im Parameterraum um $(\gamma_0 = 1,48100 \cdot 10^{-3}, f_0 = 1,85125 \cdot 10^{-5})$ mit den relativen Ellipsenradien von 6% in je γ und f . Der Mittelpunkt wurde dabei auf die abgeschätzten Werte einer vermiedenen Kreuzung gelegt. Zwar zeigen die beiden Pfade noch kein EP-typisches Vertauschungsverhalten, jedoch ist deutlich eine Wechselwirkung zwischen ihnen zu erkennen, welche ihren Verlauf deformiert. Ohne diese Wechselwirkung hätten sie ein eher elliptisches Aussehen wie in Abbildung 3.1a, d. h. in Abwesenheit einer vermiedenen Kreuzung.

4.3. Quadratische Ordnung – Oktagonmethode

Im Rahmen der Dreipunktmethode wurden in Gleichung (4.3) nur Terme der linearen Ordnung in γ und f berücksichtigt. Dies hat den Vorteil, dass das Gleichungssystem (4.6) auf eine eindeutige Lösung für die tatsächliche Position (γ_{EP}, f_{EP}) des EP im Parameterraum führt. Allerdings entstehen dabei auch gewisse Fehler, weshalb die Dreipunktmethode im System des Exzitons in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern einen sehr kleinen Konvergenzbereich aufweist. Um in diesen Bereich zu gelangen, sind numerisch sehr teure Rechnungen notwendig. Ein Ziel dieser Arbeit war es deshalb, das Auffinden von exzeptionellen Punkten zu verbessern und eine neue Methode zu finden, die mit geringerem numerischen Aufwand in einem deutlich größeren Bereich konvergiert. Das vorliegende Kapitel beschreibt den Entwicklungsprozess und die Schwierigkeiten dieser neuen Methode – der *Oktagonmethode*. Aufgrund der in Abschnitt 4.2.1 angesprochenen Schwierigkeiten beim Auffinden von exzeptionellen Punkten liegt der Wunsch nahe, eine verbesserte Methode zur Berechnung deren exakter Position zu finden. Die Methode soll die folgenden Erwartungen erfüllen:

- Wird für die Parameter (γ, f) einer vermiedenen Kreuzung ein Kreis im Parameterraum mit genau diesem Mittelpunkt umlaufen, so gibt es bei der entsprechenden Energie E_0 typischerweise zwei Eigenwerte, die sich nahe kommen und deren Pfade im Energieraum Ansätze einer Wechselwirkung aufzeigen (siehe Abbildung 4.4). Als Ausgangspunkt der neuen Methode sollen deshalb wie bei der Dreipunktmethode nur die Parameter (γ, f) sowie E_0 der vermiedenen Kreuzung dienen.
- Da der Umlauf um den EP im Parameterraum mit einer gewissen Anzahl von Schritten numerisch sehr teuer ist, soll das neue Verfahren ein sichtbares Vertauschungsverhalten der am EP beteiligten Eigenwerte nicht mehr benötigen oder den hierfür nötigen Rechenaufwand deutlich reduzieren.
- Zur Vermeidung der Unterteilung großer Ellipsen in viele kleine nach dem Verfahren in Abbildung 4.3 muss das neue Verfahren in einem größeren Bereich konvergieren als die Dreipunktmethode.

Ein erster Ansatzpunkt für die Verbesserung der Dreipunktmethode liegt in der Näherung in Gleichung (4.3). Hier werden nur lineare Ordnungen in γ und f berücksichtigt, unter der Annahme, dass die Punkte auf der Ellipse im Parameterraum nah genug am EP gewählt werden, so dass Terme höherer Ordnung vernachlässigbar werden [7]. Eine Möglichkeit, den Konvergenzbereich des Verfahrens zu vergrößern, ist demnach die Berücksichtigung der Terme quadratischer Ordnung in Gleichung (4.2b).

Sollen in Gleichung (4.2b) auch die quadratischen Terme berücksichtigt werden, so erhöht sich die Anzahl der zu bestimmenden Koeffizienten deutlich, weshalb nun neun Punkte im Parameterraum benötigt werden. Acht liegen auf den Ecken eines regelmäßigen Oktagons, während der neunte dessen Mittelpunkt markiert (siehe Abbildung 4.5). An jedem dieser Punkte $i \in \{0, \dots, 8\}$ aus Abbildung 4.5 im Parameterraum werden die zwei zu einem EP gehörenden Eigenwerte $E_{1,i}$ und $E_{2,i}$ berechnet. Dabei beschreibt $\eta_i \equiv (E_{1,i} - E_{2,i})^2$ die quadratische Differenz der Eigenwerte am Punkt (γ_i, f_i) . Mit Hilfe des Oktagons lassen sich alle Koeffizienten in Gleichung (4.2b) bestimmen:

- Der Koeffizient D entspricht dem Wert von η_0 am Punkt (γ_0, f_0) , d.h. am Mittelpunkt in Abbildung 4.5.
- Die Koeffizienten E bzw. F geben die Steigung der Kurve $(E_1 - E_2)^2$ bei konstant gehaltenem f bzw. γ an. Sie lassen sich durch eine erste numerische Ableitung berechnen. So gilt in der Notation von Abbildung 4.5

$$E = \frac{\eta_1 - \eta_5}{2h_\gamma} \quad , \quad F = \frac{\eta_3 - \eta_7}{2h_f} \quad . \quad (4.8)$$

Man beachte, dass E hier einen Koeffizient aus Gleichung (4.2b) beschreibt, während mit E_i , $i \in \{1, 2\}$, die beiden Energieeigenwerte eines EP bezeichnet werden. Das selbe gilt für den Koeffizienten F aus Gl. (4.2b), der hier nicht mehr die elektrische Feldstärke nach Abschnitt 2.1.1 bezeichnet.

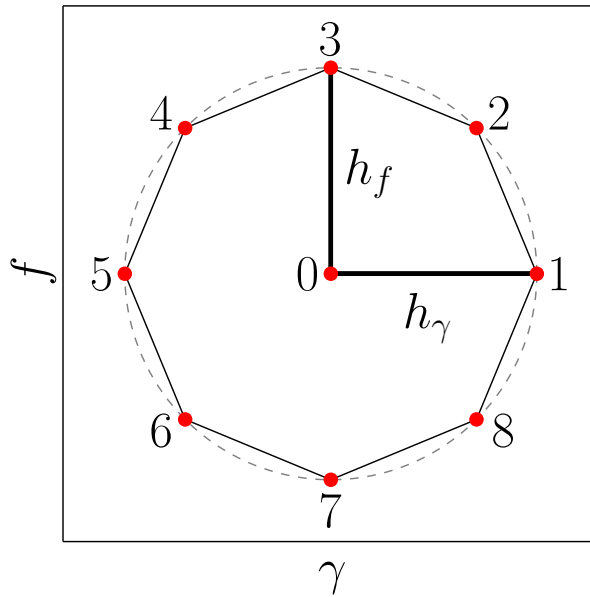


Abbildung 4.5.: Schematische Darstellung der neun Punkte im (γ, f) Parameterraum bei der Oktagonmethode. Dabei wird für jeden dieser Punkte die Eigenwertgleichung (2.39) gelöst, wodurch sich für jeden Punkt i ein Wert für $\eta_i \equiv (E_{1,i} - E_{2,i})^2$ aus den beiden am EP beteiligten Eigenwerten E_1 und E_2 berechnen lässt.

- Die Koeffizienten G bzw. I beschreiben für konstante Werte von f bzw. γ jeweils die Krümmung der Kurve $(E_1 - E_2)^2$, was einer zweiten numerischen Ableitung entspricht. Nach Abbildung 4.5 folgt

$$G = \frac{\eta_1 + \eta_5 - 2\eta_0}{2h_\gamma^2} \quad , \quad I = \frac{\eta_3 + \eta_7 - 2\eta_0}{2h_f^2} \quad . \quad (4.9)$$

- Der Koeffizient H des Mischterms in Gleichung (4.2b) lässt sich ebenfalls numerisch mit Hilfe des Oktagon berechnen, wobei vier Punkte benötigt werden. Nach Abbildung 4.5 gilt

$$H = \frac{\eta_2 - \eta_4 + \eta_6 - \eta_8}{2h_\gamma h_f} \quad . \quad (4.10)$$

Mit Hilfe des Oktagon lassen sich somit alle komplexen Koeffizienten aus Gleichung (4.2b) berechnen. Problematisch bleibt allerdings, aus den an jedem Punkt i berechneten Eigenwerten diejenigen zwei Eigenwerte E_1 und E_2 auszuwählen, die an der Bildung des EP beteiligt sind (typischerweise wurden bei einer Matrixdiagonalisierung nach Gleichung (2.39) jeweils die nächstliegenden 10 - 20 Eigenwerte zur Energie E_0 der vermiedenen Kreuzung bestimmt).

Als mögliche Lösung dieses Problems werden die relativen Oktagonradien h_γ und h_f klein genug gewählt. Somit verlaufen die Pfade der berechneten Resonanzen im Energierraum bei einem vollen Umlauf auf dem Oktagon im Parameterraum räumlich getrennt. Werden nun aus allen berechneten Eigenwerten diejenigen zwei ausgewählt, welche energetisch am nächsten an der Energie der vermiedenen Kreuzung liegen, so lassen sich die benötigten beiden Eigenwerte E_1 und E_2 ausfiltern. Im Rahmen dieser Arbeit haben sich relative Ellipsenradien von 0,03 % des jeweils absoluten Wertes von γ_0 und f_0 am Mittelpunkt des Oktagon als sinnvoll für die Größen h_γ und h_f erwiesen.

4.3.1. Iterationsschritt und Auswahl der richtigen Lösung

Zur Berechnung der exakten Position eines exzeptionellen Punktes im (γ, f) -Raum kann mit Hilfe des Oktagon aus Abbildung 4.5 und Gleichung (4.2b) ein iterativer Algorithmus der Form

$$\begin{aligned} \gamma_0^{(n+1)} &= \gamma_0^{(n)} + x^{(n)} & ; & \quad \gamma_{\text{EP}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \gamma_0^{(n)} & , \\ f_0^{(n+1)} &= f_0^{(n)} + y^{(n)} & ; & \quad f_{\text{EP}} = \lim_{n \rightarrow \infty} f_0^{(n)} \end{aligned} \quad (4.11)$$

entwickelt werden. Hierbei bezeichnen $\gamma_0^{(n)}$ und $f_0^{(n)}$ den Mittelpunkt der Oktagon im n -ten Iterationsschritt. Weiterhin gelten die Abkürzungen $x^{(n)} \equiv (\gamma_{\text{EP}}^{(n)} - \gamma_0^{(n)})$ und $y^{(n)} \equiv (f_{\text{EP}}^{(n)} - f_0^{(n)})$ mit den Abschätzungen $\gamma_{\text{EP}}^{(n)}$ und $f_{\text{EP}}^{(n)}$ für die Position des EP im Parameterraum (jeweils im n -ten Schritt).

Da nach Abschnitt 2.2.1 die Eigenwerte am EP entarten, kann zu dessen Suche die linke Seite von Gleichung (4.2b) zu Null gesetzt werden. Dies geschieht unter der Annahme, dass sich die Koeffizienten A, \dots, I in der lokalen Umgebung des EP nicht mehr ändern und die Beschreibung im Rahmen des zweidimensionalen Matrixmodells lediglich von den beiden Feldstärken γ und f abhängt. Die Entartung muss dabei sowohl für den Real- als auch für den Imaginärteil gelten

$$0 = \text{Re}(D) + \text{Re}(E)x + \text{Re}(F)y + \text{Re}(G)x^2 + \text{Re}(H)xy + \text{Re}(I)y^2 \quad , \quad (4.12a)$$

$$0 = \text{Im}(D) + \text{Im}(E)x + \text{Im}(F)y + \text{Im}(G)x^2 + \text{Im}(H)xy + \text{Im}(I)y^2 \quad , \quad (4.12b)$$

wobei die Abkürzungen $x \equiv (\gamma_{\text{EP}} - \gamma_0)$ und $y \equiv (f_{\text{EP}} - f_0)$ verwendet werden und γ_{EP} und f_{EP} jeweils eine Abschätzung für die Position des EP im Parameterraum darstellen. Hierbei handelt es sich um zwei Gleichungen mit x und y höchstens in quadratischer Ordnung, welche als Unbekannte nur noch die beiden reellen Koeffizienten γ und f enthalten.

Durch Teilen von Gleichung (4.12a) durch $\text{Re}(I)$ bzw. von Gleichung (4.12b) durch $\text{Im}(I)$ und anschließender Subtraktion der beiden resultierenden Gleichungen fällt der y^2 -Term weg. Aufgelöst nach y ergibt sich so

$$y(x) = -\frac{W(D, I) + W(E, I)x + W(G, I)x^2}{W(F, I) + W(H, I)x} \quad . \quad (4.13)$$

Hierzu wurde der Übersichtlichkeit halber die Funktion $W(U, V)$ definiert

$$W(U, V) \equiv U_i V_r - U_r V_i \quad , \quad (4.14)$$

wobei die Abkürzungen $U_i \equiv \text{Im}(U)$ und $U_r \equiv \text{Re}(U)$ mit $U, V \in \{D, E, F, G, H, I\}$ verwendet werden. Durch das Einsetzen von Gl. (4.13) in Gleichung (4.12a) entsteht für $W(F, I) + W(H, I) x \neq 0$ ein Polynom vierten Grades in x , dessen Nullstellen gesucht sind

$$\begin{aligned} 0 = & f_1 W(F, I) + I_r W(D, I)^2 \\ & + \{f_1 W(H, I) + f_2 W(F, I) + 2I_r W(D, I) W(E, I)\} x \\ & + \{f_2 W(H, I) + f_3 W(F, I) + 2I_r W(D, I) W(G, I) + I_r W(E, I)^2\} x^2 \\ & + \{f_3 W(H, I) + [2I_r W(E, I) - H_i W(F, I)] W(G, I)\} x^3 \\ & + \{[H_i W(H, I) + I_r W(G, I)] W(G, I)\} x^4 \quad . \end{aligned} \quad (4.15)$$

Dabei werden weitere Abkürzungen verwendet

$$f_1 = D_r - F_r W(D, I) \quad , \quad (4.16a)$$

$$f_2 = E_r - F_r W(E, I) - H_i W(D, I) \quad , \quad (4.16b)$$

$$f_3 = G_r - F_r W(G, I) - H_i W(E, I) \quad . \quad (4.16c)$$

Im allgemeinen Fall besitzt ein Polynom vierten Grades vier komplexe Nullstellen, es können jedoch auch zwei oder alle vier Nullstellen reell sein. Alle diese Fälle treten in der Praxis auf. Nun gilt es, falls reelle Nullstellen vorhanden sind, herauszufinden, welche davon der tatsächlichen Abschätzung für den Wert $(\gamma_{\text{EP}}, f_{\text{EP}})$ der Position des EP entspricht. Die restlichen (eventuell komplexen) Lösungen entstehen durch die mathematische Struktur der vorliegenden Methode (Näherung der Gleichungen (4.12) bis zur quadratischen Ordnung in γ und f) und haben keine weitere physikalische Relevanz. Gibt es keine reellen Nullstellen, so sollte nach Möglichkeit trotzdem eine Abschätzung für $(\gamma_{\text{EP}}, f_{\text{EP}})$ getroffen werden können. Zusammenfassend geht bei Berücksichtigung quadratischer Terme der Feldstärken γ und f in Gleichung (4.2b) die Eindeutigkeit der Lösung verloren. Es müssen weitere Überlegungen zur Auflösung dieses Mehrdeutigkeitsproblems angestellt werden.

Zur Auswahl der richtigen Lösung und zur Auflösung der Mehrdeutigkeit bzw. zum Erhalt eines Schätzwertes für γ_{EP} und f_{EP} im Falle vier komplexer Lösungen, wird die sogenannte ε -Methode verwendet, für welche die Struktur des Oktagons aus Abbildung 4.5 noch einmal betrachtet werden muss. Die Koeffizienten A bis I werden für ein Oktagon mit dem Mittelpunkt bei f_0 und γ_0 berechnet, d. h. für $x = y = 0$. Das System wird deshalb an diesem Punkt (γ_0, f_0) durch ein Matrixmodell mit genau diesen Koeffizienten am Besten beschrieben. Hiervon ausgehend ist es nachvollziehbar, die Gleichungen (4.12) erst einmal nicht auf Null, sondern gleich $(1 - \varepsilon) D$ zu setzen

$$(1 - \varepsilon) D_r = D_r + E_r x + F_r y + G_r x^2 + H_r x y + I_r y^2 \quad , \quad (4.17a)$$

$$(1 - \varepsilon) D_i = D_i + E_i x + F_i y + G_i x^2 + H_i x y + I_i y^2 \quad . \quad (4.17b)$$

4. Bestimmung der exakten Position eines EP im Parameterraum

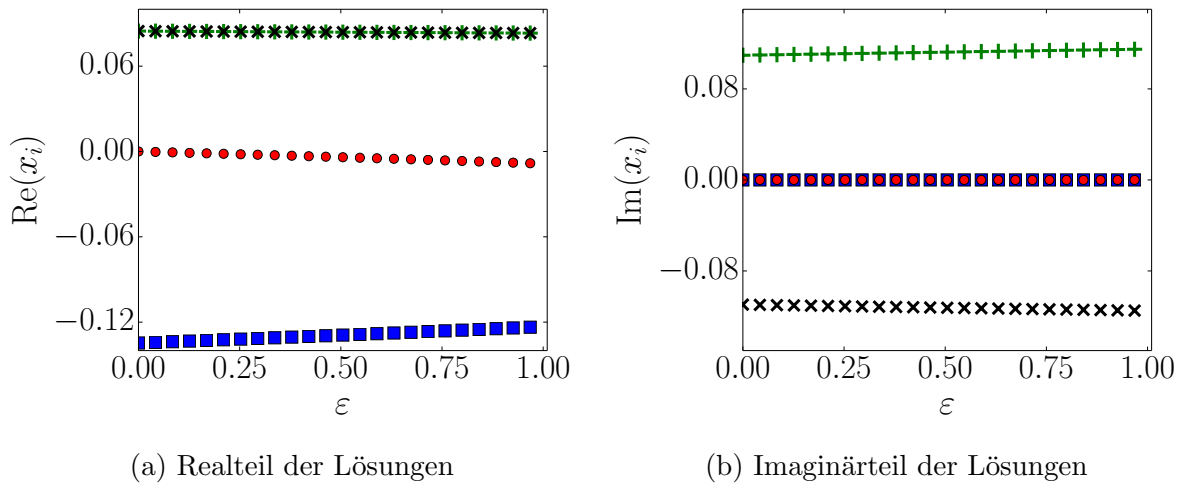
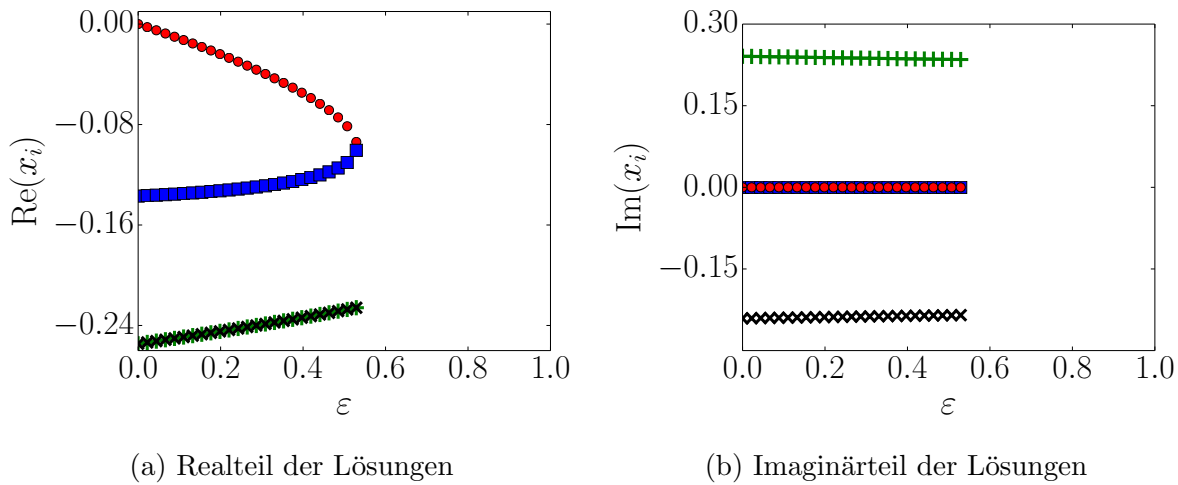


Abbildung 4.6.: Exemplarische Darstellung der ε -Methode. Für $\varepsilon = 0$ ergeben sich vier Lösungen x_i des Polynoms vierter Ordnung, welches analog zu dem auf Gleichung (4.15) führenden Vorgehen aus den Gleichungen (4.17) folgt. Zwei x_i sind rein reell und zwei sind komplex. Die physikalisch relevante Lösung ist diejenige, welche für $\varepsilon = 0$ einen verschwindenden Real- und Imaginärteil besitzt (rote Kreise). Alle anderen Lösungen haben keine physikalische Relevanz. Durch die schrittweise Änderung $\varepsilon \rightarrow 1$ lassen sich die Pfade der Lösungen durch geeignete Sortierung verfolgen, wodurch die physikalisch relevante Lösung auch für $\varepsilon = 1$ erkennbar wird. Anmerkung: In diesem Beispiel ist die betragsmäßig kleinste Lösung die richtige. Im allgemeinen Fall ist das jedoch nicht immer so.

Analog zu dem auf Gleichung (4.15) führenden Vorgehen folgt durch ineinander Einsetzen beider Gleichungen hieraus wieder eine einzelne Gleichung mit einem Polynom vierter Ordnung in x . Auch diese besitzt wieder vier (komplexe) Lösungen. Im Falle $\varepsilon = 0$ steht auf der linken Seite der Gleichungen (4.17) jeweils nur der Koeffizient D . Eine offensichtliche Lösung des Gleichungssystems ist dann diejenige mit $x = y = 0$, d. h. für $f = f_0$ und $\gamma = \gamma_0$. Dies entspricht genau dem Punkt, der durch die Koeffizienten der Oktagonmethode am Besten beschrieben wird, weshalb $x = 0$ für $\varepsilon = 0$ als ausgezeichnete der vier möglichen Lösungen betrachtet werden kann.

Wird nun der Parameter ε schrittweise von Null nach Eins vergrößert, so kann durch geeignetes Sortieren der vier jeweiligen Lösungen der Pfad dieser ausgezeichneten Lösung bis hin zu $\varepsilon = 1$ verfolgt werden (siehe Abbildung 4.6). Jetzt steht auf der linken Seite des Systems (4.17) wieder eine Null und es ergeben sich die selben vier Lösungen wie in Gleichung (4.12) bzw. (4.15), wobei nun allerdings bekannt ist, welche davon aus der Lösung $x = 0$ für $\varepsilon = 0$ entsteht. Der zugehörige Wert für y errechnet sich dann über Gleichung (4.13). Mit Hilfe der ε -Methode lässt sich das Problem der Mehrdeutigkeit lösen und aus den vier möglichen (komplexen) Lösungen eines Polynoms vierter Ord-



(a) Realteil der Lösungen

(b) Imaginärteil der Lösungen

Abbildung 4.7.: Exemplarische Darstellung der ε -Methode mit vorzeitigem Abbruch bei $\varepsilon = 0,53$. Wieder gibt es für $\varepsilon = 0$ eine ausgezeichnete Lösung mit verschwindendem Real- und Imaginärteil (rote Kreise). Diese fällt bei $\varepsilon = 0,53$ mit der zweiten reellen Lösung in einer Verzweigungssingularität zusammen und alle Lösungen werden komplex. An diesem Punkt bricht der Algorithmus ab.

nung den richtigen Schätzwert für die Position des EP im Parameterraum ableiten. Die ausgezeichnete Lösung $x = x_{\text{EP}}$ und $y = y_{\text{EP}}$ für $\varepsilon = 1$ dient als neue Abschätzung für $(\gamma_{\text{EP}}, f_{\text{EP}})$, d. h. $\gamma_{\text{EP}} = x_{\text{EP}} + \gamma_0$ und $f_{\text{EP}} = y_{\text{EP}} + f_0$. Nun kann ein nächster Iterationsschritt mit einem neuen Oktagon gestartet werden, welches die abgeschätzte Position des EP als Mittelpunkt enthält. Das Verfahren nähert sich somit iterativ der tatsächlichen Position des EP an.

Für den Fall, dass alle Lösungen von Gleichung (4.15) für $\varepsilon = 1$ komplex sind, kann die iterative Suche nach dem exzeptionellen Punkt trotzdem fortgeführt werden. Dazu wird zuerst für $\varepsilon = 0$ die physikalisch relevante Lösung ermittelt. Anschließend wird ε schrittweise erhöht, bis diese Lösung komplex wird, was in diesem Fall für $0 < \varepsilon < 1$ geschieht. Nun wird der nächste Iterationsschritt des Verfahrens mit den letzten reellen Werten der ausgezeichneten Lösung gestartet. In vielen Fällen, in welchen solch ein Verhalten auftritt, ergeben sich nach wenigen Iterationsschritten mit rein komplexen Lösungen wieder reelle Lösungen und der Algorithmus konvergiert gegen den EP. Eine graphische Darstellung der ε -Methode mit vorzeitigem Abbruch findet sich in Abbildung 4.7. Falls die ε -Methode nicht konvergiert, wird der Wert für ε , an welchem die ausgezeichnete Lösung komplex wird, immer kleiner. Unterschreitet er eine gewisse numerische Grenze, bleibt die Abschätzung für $(\gamma_{\text{EP}}, f_{\text{EP}})$ während der verschiedenen Iterationsschritte gleich und der Algorithmus steckt in einer Endlosschleife fest.

4.3.2. Konvergenzverhalten und Rechenzeit

Für den in Abschnitt 4.3.1 vorgestellten iterativen Algorithmus muss noch ein Kriterium definiert werden, das die Güte der Konvergenz charakterisiert. Bei jedem Iterationsschritt wird dabei der Mittelpunkt (γ_0, f_0) des neuen Oktagons an die berechnete Position des EP aus dem letzten Schritt gesetzt. Nach Gleichung (4.2b) gilt am Punkt (γ_0, f_0)

$$(E_1 - E_2)^2 = D = \eta \quad . \quad (4.18)$$

Der Koeffizient $D = \eta$ beschreibt somit die quadratische Differenz der Eigenwerte am Mittelpunkt des Oktagons. Da nach Abschnitt 2.2.1 die Eigenwerte am exzeptionellen Punkt entarten, verschwindet dort ihre Differenz. Als Konsequenz wird $|\eta|$ immer kleiner, je näher sich der Mittelpunkt des Oktagons an der tatsächlichen Position des exzeptionellen Punktes befindet. Der iterative Algorithmus konvergiert dann, wenn sich $|\eta|$ bei jedem Iterationsschritt verringert. Eine typische Auftragung von $\sqrt{|\eta|} = |E_{1,i} - E_{2,i}|$ über den Iterationsschritten i , ausgehend von der vermiedenen Kreuzung aus Abbildung 4.4, findet sich in Abbildung 4.8 (rote Kurve).

Als eine weitere Möglichkeit zur Veranschaulichung des Konvergenzverhaltens lassen sich die komplexen Energien der am EP beteiligten Resonanzen an der genäherten Position γ_{EP} und f_{EP} eines jeden Iterationsschrittes im Energieraum auftragen (siehe Abbildung 4.9). Die beiden Resonanzen (\times in Abbildung 4.9) nähern sich bei jedem Iterationsschritt im komplexen Energieraum an. Gleichzeitig ändert sich die Abschätzung für die wirkliche Position des EP (\circ in diesem Raum (Mitte¹ zwischen den beiden Resonanzen eines Iterationsschrittes) für die ersten Schritte noch deutlich, konvergiert dann aber ebenfalls gegen einen bestimmten Wert, wodurch sich die Energie des EP zu

$$E_{\text{EP}} = -7,647\,637\,585\,20 \cdot 10^{-3} - 8,461\,814\,32 \cdot 10^{-7}i \quad [\text{a.u.}]$$

bestimmen lässt. Die Abschätzung für die tatsächliche Position des EP im Parameterraum ergibt sich aus dem Mittelpunkt des Oktagons mit dem kleinsten Wert von $|E_{1,i} - E_{2,i}|$ zu

$$\gamma_{\text{EP}} = 8,598\,633\,574\,1 \cdot 10^{-4} \quad \text{und} \quad f_{\text{EP}} = 2,005\,076\,384\,6 \cdot 10^{-5} \quad .$$

Wird nach der roten Kurve in Abbildung 4.8 ein Algorithmus verwendet, der auf der Minimierung von $|\eta|$ basiert, so kann es zum vorzeitigen Abbruch des Konvergenzverfahrens kommen, falls sich $|\eta|$ schon während den ersten Iterationsschritten erhöht. Dies tritt z. B. dann auf, wenn die gewählten Startwerte so weit vom EP entfernt liegen, dass der Algorithmus erst einen gewissen Bereich im Parameterraum durchlaufen muss, bevor es zur tatsächlichen Konvergenz an einem EP kommt. Um dieses Problem zu umgehen, kann anstelle der Minimierung von $|\eta|$ auch die Konvergenz der vermutlichen Position

¹Eine Rechtfertigung für diese Mittlung der Resonanzenergien am EP folgt im Fortgang dieses Kapitels

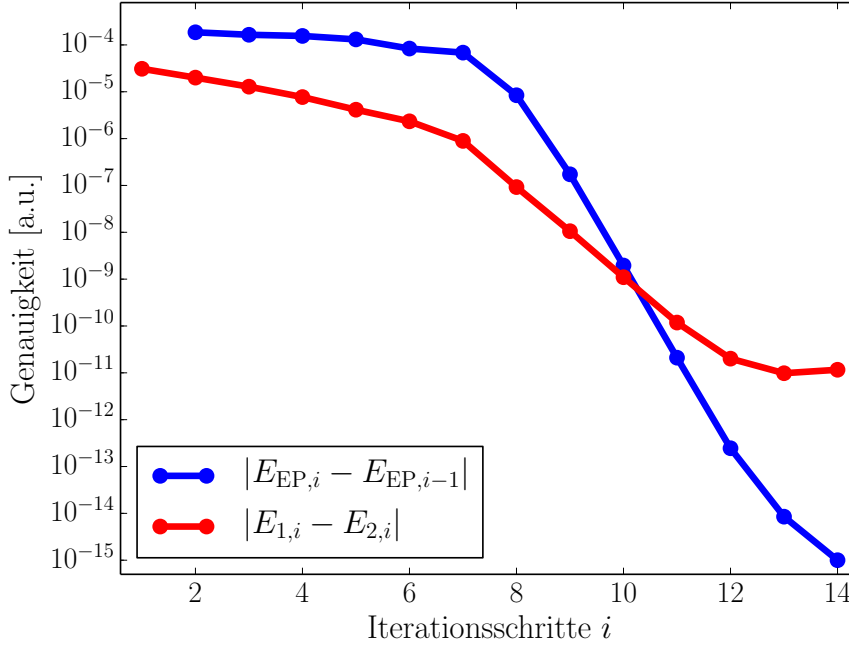


Abbildung 4.8.: Blaue Kurve: Konvergenzverhalten der Abschätzung für die tatsächliche Position des exzeptionellen Punktes $E_{EP,i} = (E_{1,i} + E_{2,i})/2$ beim i -ten Iterationsschritt (blaue Kurve). Dabei bezeichnen $E_{1,i}$ und $E_{2,i}$ die Energien der beiden zum EP gehörenden Eigenwerte am Mittelpunkt des Oktagons beim i -ten Iterationsschritt. Rote Kurve: Auftragung der betragsmäßigen Differenz der Eigenwerte $|E_{1,i} - E_{2,i}|$ an diesem Mittelpunkt für jeden Iterationsschritt.

E_{EP} im Energieraum gefordert werden (siehe hierzu die Mittelpunkte in Abbildung 4.9)

$$|E_{EP,i} - E_{EP,i-1}| < \text{tol} \quad . \quad (4.19)$$

Hier beschreibt $E_{EP,i}$ die vermutliche Position des EP beim i -ten Iterationsschritt und $E_{EP,i-1}$ diejenige des vorhergehenden Schrittes. Die betragsmäßige Differenz dieser beiden Größen soll kleiner sein, als eine numerische Toleranz (z. B. $\text{tol} = 10^{-14}$ für Maschinengenauigkeit). Das Konvergenzverhalten der Abschätzung $E_{EP,i} = (E_{1,i} + E_{2,i})/2$ für die tatsächliche Position des exzeptionellen Punktes im i -ten Iterationsschritt ist in Abbildung 4.8 als blaue Kurve dargestellt. Zur Motivation dieser Abschätzung für die tatsächliche Position des EP als Mittelwert der beiden Eigenenergien am Mittelpunkt des Oktagons werden die beiden Größen κ und η aus Gleichung (4.2) benötigt, welche durch die Koeffizienten A, \dots, I der Oktagonmethode bestimmt sind. Durch sie lassen sich die beiden Eigenwerte E_1 und E_2 in der Nähe des EP berechnen, wobei mit $E_1 - E_2 = \sqrt{\eta}$

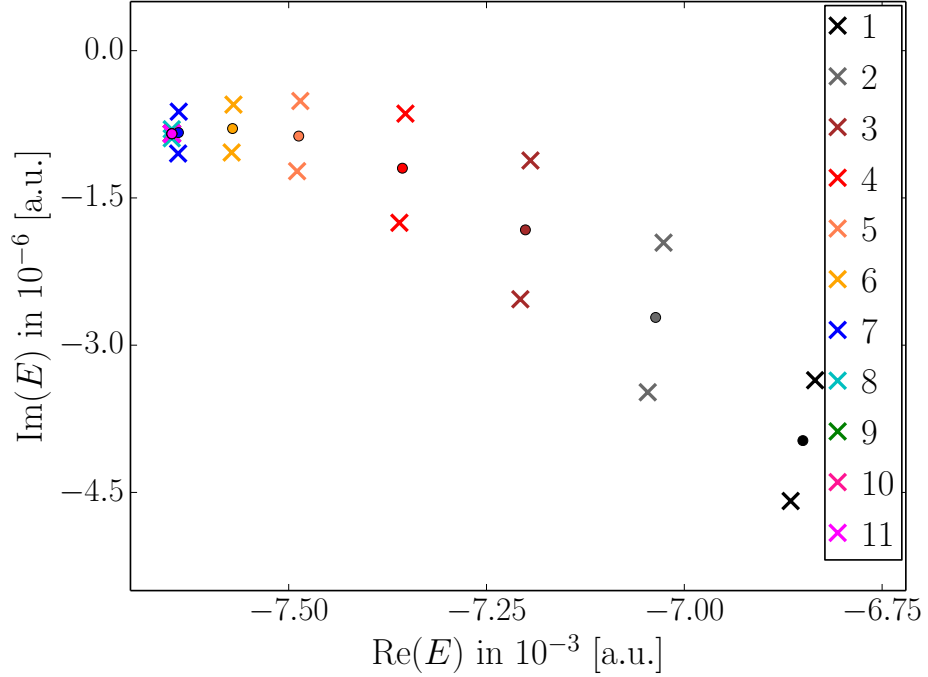


Abbildung 4.9.: Konvergenzverhalten der beiden am EP beteiligten Resonanzen \times an der genäherten Position γ_{EP} und f_{EP} der ersten elf Iterationsschritte aus Abbildung 4.8. Einerseits nähern sich die beiden Resonanzen immer weiter an und entarten am EP, andererseits konvergiert die Abschätzung für die tatsächliche Position des EP im Energieraum \circ (Mitte zwischen den beiden Resonanzen eines Iterationsschrittes) gegen einen bestimmten Punkt.

eine komplexe Wurzel gezogen werden muss. Mit $\kappa = E_1 + E_2$ folgt so

$$E_1 = \frac{1}{2} \left(\kappa \pm \sqrt{|\eta|} e^{i \arg(\eta)/2} \right) \quad , \quad (4.20a)$$

$$E_2 = \frac{1}{2} \left(\kappa \mp \sqrt{|\eta|} e^{i \arg(\eta)/2} \right) \quad . \quad (4.20b)$$

Am EP gilt $|\eta| = 0$, in diesem Fall entarten die beiden Eigenwerte zu $E_{\text{EP,guess}} = \kappa/2$. Wird hier die ursprüngliche Definition von κ eingesetzt, so gilt

$$E_{\text{EP,guess}} = \frac{E_1 + E_2}{2} \quad . \quad (4.21)$$

Ein Vergleich der Steigungen der Kurven aus Abbildung 4.8 zeigt, dass die nach Gleichung (4.21) abgeschätzte Position für den EP zuerst etwas langsamer, dann aber deutlich schneller und genauer konvergiert, als die beiden Eigenwerte am EP entarten. Wäh-

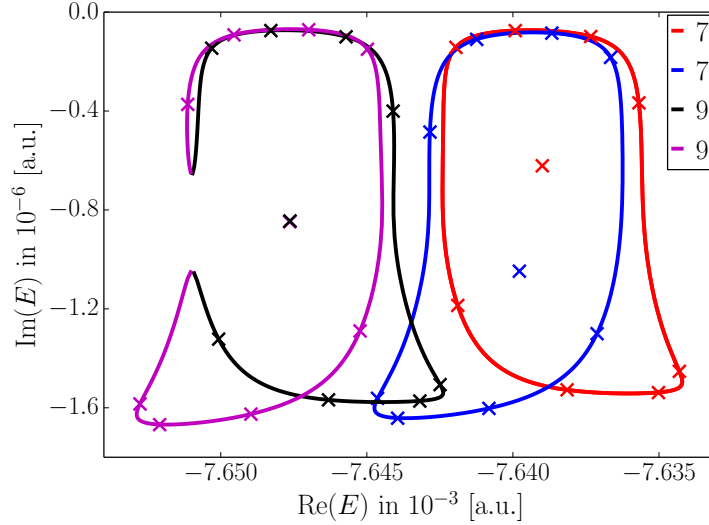


Abbildung 4.10.: Vergrößerung des siebten und des neunten Iterationsschrittes aus Abbildung 4.9. Mit \times markiert sind die Punkte aus der quantenmechanischen Lösung von Gleichung (2.39), die Verbindungslinien entstammen dem Verfahren nach Abschnitt 4.3.3. Zur Verdeutlichung des Vertauschungsverhaltens der beiden jeweiligen Eigenwerte sind diese Linien farblich sortiert. Während im siebten Schritt die beiden Eigenwerte noch auf getrennten Schleifen verlaufen (d. h. der EP liegt noch nicht im Oktagon), tauschen sie beim neunten Iterationsschritt für einen vollständigen Umlauf im Parameterraum ihre Position im abgebildeten Energieraum. Die Punktpaare in der Mitte der Kurven markieren die Eigenwerte E_1 und E_2 , berechnet am Mittelpunkt des Oktagonmarkings. Sie liegen beim neunten Iterationsschritt in dieser Auftragung nahezu übereinander, der Mittelpunkt des zugehörigen Oktagonmarkings liegt demnach sehr nahe am EP.

rend die Position des EP im Energieraum nach 14 Iterationsschritten auf Maschinengenauigkeit konvergiert ist, lässt sich die Entartung der Eigenwerte an diesem Punkt lediglich auf etwa 10^{-10} [a.u.] genau berechnen.

Mit Hilfe des neuen, iterativen Verfahrens ist es möglich, die exakte Position eines exzeptionellen Punktes zu bestimmen. Hierbei wird nur von den Parametern (γ, f) der externen Felder und der Energie E_0 einer vermiedenen Kreuzung ausgegangen. Wie Abbildung 4.4 verdeutlicht, muss als Startpunkt nicht notwendigerweise ein EP-typisches Vertauschungsverhalten vorliegen. Wird die zugrunde liegende vermiedene Kreuzung als Startpunkt gewählt, so ist das Vertauschungsverhalten der Eigenwerte erst ab dem achten Iterationsschritt zu betrachten (vgl. Abbildung 4.10). Werden für jeden Oktagonpunkt drei Rechnungen mit unterschiedlichen komplexen Rotationswinkeln α in $b = |b| \exp(i\alpha)$ zur

Überprüfung der Konvergenz durchgeführt, so muss die Eigenwertgleichung des Systems 27-mal pro Schritt gelöst werden. Ist die Position E_0 des EP im Energierraum näherungsweise bekannt, so genügt es, die zehn nächsten Eigenwerte zu E_0 mit der Lösungsroutine für Bandmatrizen (siehe Abschnitt 2.3.3) zu berechnen, wodurch das einmalige Lösen der Eigenwertgleichung (2.39) für einen Punkt auf dem Oktagon eine Rechenzeit von etwa einer Minute benötigt. Werden die Rechnungen mit Hilfe von *HTCondor* dabei auf verschiedene Rechenkern verteilt, so benötigt ein Iterationsschritt der Oktagonmethode insgesamt nur etwa eine Minute Rechenzeit.

4.3.3. Vertauschungsverhalten und Windungszahl

Durch das Verfahren in Abschnitt 4.3.2 lässt sich zwar die Konvergenz des iterativen Algorithmus überprüfen, nicht jedoch, ob es sich bei dem gefundenen Punkt wirklich um einen exzeptionellen Punkt handelt. Bei den Rechnungen in Abschnitt 3.2 wurde das Vertauschungsverhalten der Eigenwerte bei einer vollständigen Umkreisung des EP im Parameterraum als hinreichendes Kriterium verwendet. Ohne weitere Maßnahmen ist dies bei der Oktagonmethode nicht möglich, da sich die an den neun Punkten berechneten Eigenwerte nicht ohne weiteres farblich sortieren lassen.

Im Rahmen der Oktagonmethode werden jedoch die Entwicklungskoeffizienten von Gleichungen (4.2) bestimmt, wodurch κ und η für einen gegebenen Parametersatz (γ, f) eindeutig festgelegt sind. Da es sich hier wieder um zwei Gleichung für zwei Unbekannte handelt, lassen sich die beiden am EP beteiligten Eigenwerte E_1 und E_2 für einen beliebigen Punkt (γ, f) berechnen

$$E_1 = \frac{\kappa + \sqrt{\eta}}{2} \quad , \quad (4.22a)$$

$$E_2 = \frac{\kappa - \sqrt{\eta}}{2} \quad , \quad (4.22b)$$

wobei jeweils eine komplexe Wurzel gezogen werden muss.

Die äußeren Punkte des Oktagons in Abbildung 4.5 liegen auf einem Kreis bzw. auf einer Ellipse mit bekannten relativen Radien in γ und f . Wird dieser Kreis im Parameterraum nun numerisch in kleinen Abständen diskretisiert (im Rahmen dieser Arbeit wurden typischerweise 500 - 1000 Schritte verwendet), so können mit Hilfe der Gleichungen (4.22) für jeden diskreten Punkt (γ, f) die beiden Eigenwerte E_1 und E_2 berechnet und analog zum in Abschnitt 3.2 vorgestellten Verfahren farblich zu ihren Vorgängern sortiert werden. So entstehen im Energierraum für die beiden Eigenwerte Pfade, wie sie bei einer Umkreisung des EP im Parameterraum nach Abbildung 3.3b entstehen würden. Der einzige Unterschied besteht darin, dass diesmal die quantenmechanische Berechnung nach Gleichung (2.39) nicht mehr für jeden Punkt im Parameterraum, sondern nur noch für die neun Punkte auf dem Oktagon durchgeführt werden muss, was den Rechenaufwand erheblich verringert.

Eine Darstellung der nach diesem Vorgehen berechneten Pfade für zwei verschiedene Iterationsschritte der Oktagonmethode für den Fall aus Abbildung 4.4 findet sich in Abbildung 4.10. Die quantenmechanisch berechneten Punkte liegen dabei exakt auf den durch Gleichung (4.2) berechneten Pfaden. Erst durch die farblich sortierte Darstellung der Pfade lässt sich das Vertauschungsverhalten der berechneten Eigenwerte nachvollziehen. Dies wäre allein durch die Auftragung der quantenmechanisch berechneten Energieeigenwerte an den Oktagonpunkten nicht möglich.

Das hier vorgestellte Verfahren erlaubt es, die Pfade im Energieraum sichtbar zu machen, auf welchen sich die Eigenwerte bei einer vollständigen Umkreisung im Parameterraum bewegen. Ein EP liegt dann vor, wenn die Pfade das typische Vertauschungsverhalten der Eigenwerte nach Abschnitt 2.2 zeigen. Um nicht jedes Bild graphisch auswerten zu müssen, wird nun eine Methode vorgestellt, mit welcher sich der Verlauf der Pfade automatisiert auswerten lässt.

Grundlegende Annahme hierfür ist, dass die beiden am exzeptionellen Punkt beteiligten Eigenwerte E_1 und E_2 direkt an diesem entarten, d. h. es gilt $(E_1 - E_2) = 0$. An jedem anderen Punkt in der näheren Umgebung ist dieser Wert jedoch ungleich Null.

Wird im Parameterraum (γ, f) eine geschlossene Kurve durchlaufen, so durchläuft auch $\eta = (E_1 - E_2)^2$ eine geschlossene Kurve in der komplexen Ebene (siehe hierzu Abbildung 4.11). Nach Gleichung (4.2b) lautet der exakte Zusammenhang

$$\eta = D + E(\gamma - \gamma_0) + F(f - f_0) + G(\gamma - \gamma_0)^2 + H(\gamma - \gamma_0)(f - f_0) + I(f - f_0)^2 \quad , \quad (4.23)$$

wobei sich die Koeffizienten D, E, F, G, H, I mit Hilfe der Oktagonmethode nach Abschnitt 4.3 bestimmen lassen. Befindet sich der Nullpunkt $\eta = 0$ (d. h. notwendiges Kriterium für einen exzeptionellen Punkt) innerhalb dieser geschlossenen Kurve, so muss die Kurve im Parameterraum (γ, f) ebenfalls einen exzeptionellen Punkt umlaufen. Dies lässt sich durch Zusammenziehen der Kurve im Parameterraum begründen, wobei sich auch die Kurve in der komplexen η -Ebene zusammenzieht und somit irgendwann den Ursprung überstreicht. Jetzt durchläuft der geschlossene Weg im Parameterraum den exzeptionellen Punkt.

Befindet sich der Ursprung der komplexen Ebene jedoch nicht innerhalb der geschlossenen Kurve η , so lässt sich die Kurve im Parameterraum auf einen beliebigen, innerhalb des ursprünglichen Verlaufs liegenden, Punkt zusammenziehen, ohne dass die Kurve in der komplexen η -Ebene den Ursprung überstreicht. Innerhalb der Kurve im Parameterraum befindet sich demnach kein exzeptioneller Punkt.

Die Frage nach dem Auftreten eines exzeptionellen Punktes innerhalb des Oktagons, bzw. nach dem Vertauschungsverhalten der Eigenwerte bei einem Umlauf im Parameterraum nach 4.3.3, reduziert sich somit auf die Frage, ob der Ursprung innerhalb der dabei entstehenden geschlossenen Kurve η liegt.

Nach dem Residuensatz² gilt für eine analytische Funktion $f(\eta) = 1/\eta$ mit $\eta \in \mathbb{C}$ für

²Für eine in einem Gebiet G bis auf isolierte Singularitäten analytische Funktion $f(z)$ mit $z \in \mathbb{C}$ gilt mit einer stückweise glatten Kurve C , welche ganz in G liegt und keine Singularitäten berührt:

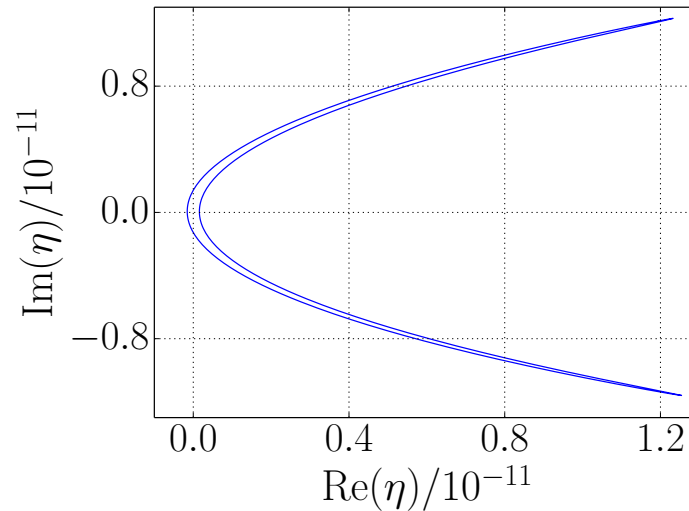


Abbildung 4.11.: Auftragung von $\eta = (E_1 - E_2)^2$ in der komplexen Ebene nach Gleichung (4.23) für einen vollen Umlauf im (γ, f) -Raum in 500 Schritten bei einem relativen Radius von $2 \cdot 10^{-3}$ um den Mittelpunkt $(\gamma_0 = 8,598\,646 \cdot 10^{-4}, f_0 = 2,005\,076 \cdot 10^{-5})$. Die Koeffizienten D, E, F, G, H, I entstammen der Oktagonmethode des neunten Iterationsschrittes aus Abbildung 4.8.

einen beliebigen Weg C in der komplexen Ebene

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{1}{\eta} dz = W_{\eta=0} \quad , \quad (4.24)$$

wobei $W_{\eta=0}$ die Windungszahl von C um den Ursprung beschreibt. Die quadratische Differenz $\eta = (E_1 - E_2)^2$ der beiden an der Bildung eines exzeptionellen Punktes beteiligten (komplexen) Eigenwerte E_1 und E_2 ist ebenfalls eine komplexe Zahl, welche nach Gleichung (4.23) von den Parametern γ und f abhängt. Durch die Wahl einer Parametrisierung für einen bestimmten Weg in der komplexen Ebene kann Integral (4.24) umgeschrieben werden zu

$$W_{\eta=0} = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} \frac{\eta'(\varphi)}{\eta(\varphi)} d\varphi \quad . \quad (4.25)$$

Hierbei wurde der Weg gewählt, bei welchem sich $\gamma(\varphi)$ und $f(\varphi)$ aus Gleichung (4.23) entsprechend Abbildung 3.3a auf einer Ellipse im Parameterraum ändern, welche ihrerseits durch den Winkel φ parametrisiert wird. Dadurch entstehen Kurven in der komplexen η -Ebene, wie sie in Abbildung 4.11 dargestellt sind.

$\frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) dz = \sum_{a \in G} W_a \text{Res}_a f$, wobei W_a die Windungszahl der Kurve C im Bezug auf die Singularität a und $\text{Res}_a f$ das Residuum von f in a ist. Die Summe verläuft dabei über alle Singularitäten a in G .

Da es sich bei dem gewählten Weg um eine einfach geschlossene Kurve mit positivem Umlaufsinn handelt, sind im Falle eines EP nur zwei Windungszahlen möglich. Für $W_{\eta=0} = 1$ befindet sich der Ursprung innerhalb, für $W_{\eta=0} = 0$ außerhalb der geschlossenen Kurve.

Durch die Diskretisierung der Ellipse im (γ, f) -Raum in n Schritte kann η nach Gleichung (4.23) bei bekannten Koeffizienten D, E, F, G, H, I für jeden diskreten Punkt $(\gamma(\varphi_n), f(\varphi_n))$ berechnet werden. Das Integral (4.25) lässt sich somit ebenfalls diskret berechnen

$$W_{\eta=0} = \frac{1}{2\pi i} \sum_{i=1}^n \frac{\eta(\varphi_{i+1}) - \eta(\varphi_{i-1})}{2\eta(\varphi_i)} . \quad (4.26)$$

Ergebnis ist die Windungszahl des geschlossenen Weges $\eta(\varphi)$ in der komplexen Ebene. Mit ihrem Zahlenwert lässt sich entscheiden, ob ein EP im Oktagon liegt und dadurch die Eigenwerte das typische Vertauschungsverhalten eines exzeptionellen Punktes zeigen oder nicht. Liegt die Windungszahl nicht klar erkennbar bei Null oder Eins, so muss die Anzahl der Schritte auf der Ellipse erhöht werden.

An dieser Stelle bleibt noch die Frage zu klären, was an einer Stelle passiert, an der zwei Resonanzen zwar entarten, jedoch keinen EP bilden. Wird so eine Stelle im Parameterraum kontinuierlich umkreist (parametrisiert durch den Winkel ϕ), so kehren die Resonanzen nach einer vollständigen Umkreisung zu ihrer Ausgangsposition zurück und vertauschen nicht wie im Falle eines EP. Im Anklang an Gleichung (2.24) sind die Resonanzen an einem EP somit proportional zu $\pm e^{i\phi/2}$ und Resonanzen an einer Entartung proportional zu $\pm e^{i\phi}$. Da die Kurve η aus Abbildung 4.11 der quadratischen Differenz dieser Resonanzen entspricht, wird sie somit im Falle eines EP genau einmal und im Falle einer einfachen Entartung zweimal durchlaufen, wobei sich dann eine Windungszahl von Zwei ergeben würde. Zusammenfassend gilt somit: für $W_{\eta=0} = 0$ befindet sich weder ein EP, noch eine einfache Entartung zweier Resonanzen innerhalb des Oktagon-Umkreises im Parameterraum. Im Falle $W_{\eta=0} = 1$ befindet sich ein EP innerhalb dieses Kreises, für $W_{\eta=0} = 2$ lediglich eine einfache Entartung zweier Resonanzen. Eine solche Entartung der Eigenwerte ohne Entartung der Eigenvektoren wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeiten jedoch in keinem Fall beobachtet.

4.4. Beispiele für exzeptionelle Punkte

Durch die Oktagonmethode steht ein Werkzeug zur Verfügung, das die Suche nach exzeptionellen Punkten deutlich vereinfacht. Sie können, verglichen mit der Dreipunktmethode, einerseits schneller und andererseits mit einer größeren Wahl der Startparameter gefunden werden. Im vorliegenden Kapitel wird der Fragestellung nachgegangen, in welchen Parameterbereichen der äußeren Felder exzeptionelle Punkte gefunden werden können. Ausgehend von zu Abbildung 3.2 analogen Spektren mit unterschiedlichen

Verhältnissen von γ/f und unterschiedlichen Feldstärkebereichen wurde die Oktagonmethode an den jeweiligen Verdachtsstellen einer vermiedenen Kreuzung gestartet. Für alle so gefundenen, auskonvergierten und durch das Vertauschungsverhalten der Eigenwerte bestätigten exzeptionellen Punkte wurde anschließend die Position $(\gamma_{\text{EP}}, f_{\text{EP}})$ sowie der Real- und Imaginärteil ihrer Energie notiert.

Um alle diese Informationen in einer Abbildung darstellen zu können, ist eine vierdimensionale Auftragung notwendig. Die vierte Dimension (Imaginärteil der Energie) lässt sich in eine Farbcodierung der einzelnen Punkte umwandeln, wodurch das dreidimensionale Schaubild in Abbildung 4.12 entsteht. Ein Großteil der gefundenen exzeptionellen Punkte in Abbildung 4.12 befindet sich bei relativ kleinen elektrischen und magnetischen Feldstärken von $(\gamma_{\text{EP}} \approx 10^{-2}, f_{\text{EP}} \approx 10^{-4})$. Sie besitzen bei diesen kleinen Feldstärken einen betragsmäßig eher kleinen Imaginärteil ihrer Energie im Bereich zwischen $\text{Im}(E) \approx 10^{-7}$ [a.u.] bis 10^{-4} [a.u.]. Nach Gleichung (2.1) bedeutet ein betragsmäßig kleinerer Imaginärteil eine längere Lebensdauer der an der Bildung des jeweiligen EP beteiligten Zustände. Erst für höhere Feldstärken in γ und f steigen die Imaginärteile der Energie betragsmäßig an, bleiben dabei aber immer negativ. Dies ist physikalisch notwendig, da ansonsten nach Gleichung (2.1) die beteiligten Resonanzen anwachsen und nicht zerfallen würden. Für kleine Feldstärken bleibt die reelle Energie der gefundenen EP ebenfalls negativ. Erst für höhere Feldstärken werden auch exzeptionelle Punkte mit positiver reeller Energie gefunden. Der Nullpunkt der reellen Energieachse ist dabei über den Energienullpunkt des Exzitons in der Abwesenheit äußerer Felder definiert. An dieser Stelle ist noch einmal deutlich hervorzuheben, dass es sich bei Abbildung 4.12 um keine vollständige Darstellung aller exzeptionellen Punkte in diesem Parameterbereich handelt. Es sind lediglich alle im Rahmen dieser Masterarbeit gefundenen EP aufgeführt. Somit lässt sich allenfalls eine Aussage treffen, in welchem Parameterbereich exzeptionelle Punkte leichter gefunden werden können (da die Oktagonmethode in einem größeren Bereich konvergiert), nicht jedoch über die absolute Dichte vorhandener exzeptioneller Punkte in einem Gebiet.

Die Abbildungen 4.13a bis 4.13c zeigen zweidimensionale Projektionen aus Abbild. 4.12. In Abbildung 4.13a finden sich die meisten EP für kleine Felder $\gamma < 10^{-2}$, ausgehend von $\text{Re}(E) = 0$ [a.u.]. Für steigende Feldstärken γ sinkt hier die Energie der gefundenen EP, da immer tiefer gebundene Exzitonenzustände von den äußeren Feldern beeinflusst werden. Anders gesagt, für einen tiefer gebundenen Zustand muss die äußere Feldstärke erst einmal groß genug sein, sodass dieser und ein weiterer Zustand durch die äußeren Felder so stark deformiert werden, dass sie sich nahe kommen und einen EP bilden können. Selbes Verhalten ergibt sich auch in Abbildung 4.13b für kleine Felder ($f < 10^{-4}$). Für die Bereiche höherer Feldstärke γ scheinen die gefundenen exzeptionellen Punkte in der Projektion 4.13a auf zwei Zweigen zu liegen, die sich für höhere Feldstärken in Richtung der positiven reellen Energieachse erstrecken. In diesem Feldstärkebereich sind somit auch exzeptionelle Punkte mit einer Energie zu finden, die größer ist, als der Nullpunkt der reellen Energieachse, definiert bei Abwesenheit externer Felder. In Abbildung 4.13b zeigt sich ein qualitativ ähnliches Verhalten, die gefundenen EP auf der positiven Energieach-

se finden sich ebenfalls erst bei großen Feldstärken in f . Hier lassen sich jedoch keine einzelnen Zweige erkennen. Bei der Auftragung in Diagramm 4.13c befinden sich alle gefundenen EP für kleine Felder in der Nähe der Winkelhalbierenden, erst für den Bereich höherer Feldstärken ergeben sich Abweichungen von diesem Verhalten. Die Abbildung veranschaulicht somit, dass beide externen Felder an der Bildung eines exzeptionellen Punktes beteiligt sind, ein einzelnes der beiden Felder ist nicht ausreichend. Abbildung 4.13d zeigt eine Auftragung des Verhältnisses γ_{EP} zu f_{EP} über der reellen Energieachse. Die Punkte mit besonders großen Werten dieses Verhältnisses zeigen eine Häufung leicht unterhalb des Nullpunktes der reellen Achse. Allerdings soll an dieser Stelle noch einmal deutlich hervorgehoben werden, dass es sich bei der Auftragung lediglich um alle gefundenen EP und nicht um alle möglicherweise im System vorhandenen exzeptionellen Punkte handelt.

Die Werte aller im Rahmen dieser Arbeit gefundenen exzeptionellen Punkte sind in Tabelle 4.1 noch einmal aufgeführt. Tabelle 4.2 enthält die nach Anhang B umgerechneten Werte für atomaren Wasserstoff, die entsprechenden Werte für Cu_2O finden sich in Tabelle 4.3. Ein Vergleich dieser beiden Tabellen zeigt, dass die EP bei atomarem Wasserstoff experimentell nicht zugänglich sind, wohingegen in Cu_2O 24 EP unterhalb einer magnetischen Flussdichte von sieben Tesla gefunden wurden. Bis zu dieser Grenze wurden an Rydberg-Exzitonen in Cu_2O schon Experimente durchgeführt [20], eine experimentelle Überprüfung der theoretischen Vorhersagen dieser Arbeit ist somit möglich.

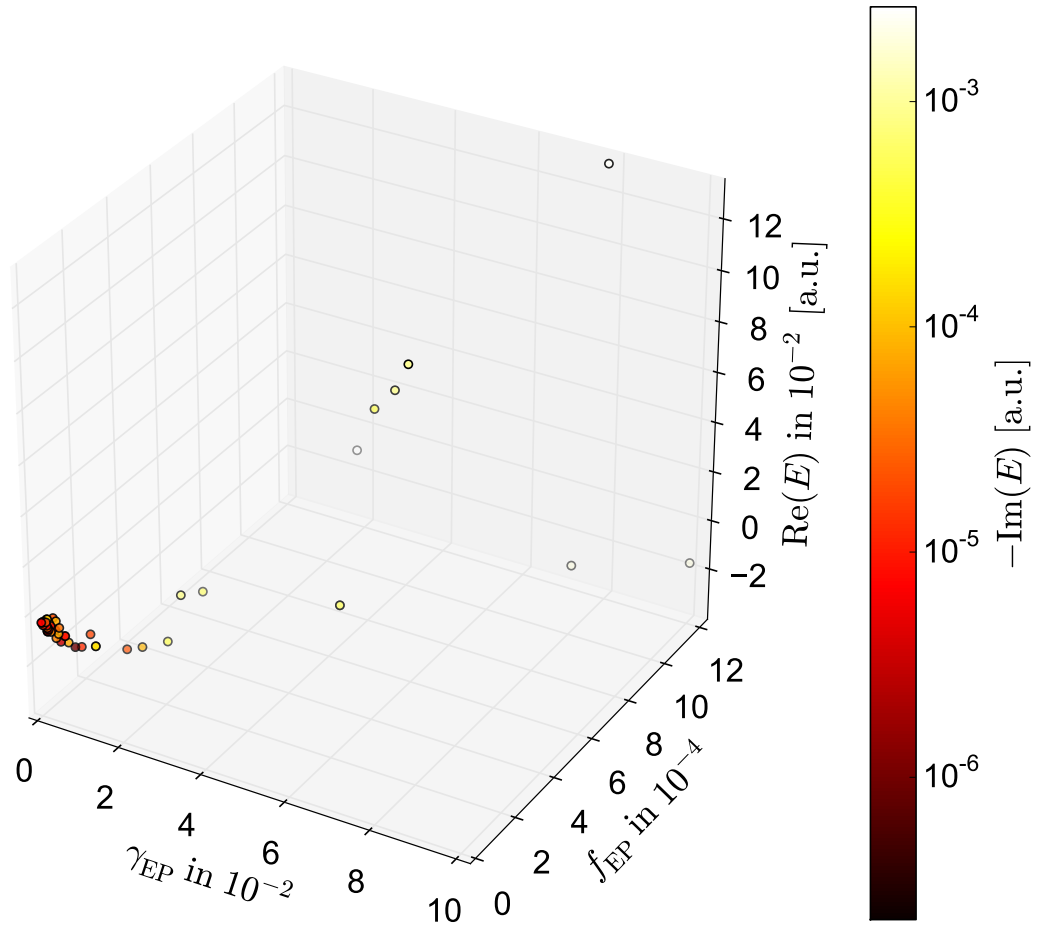


Abbildung 4.12.: Auftragung der gefundenen exzeptionellen Punkte in einem Exziton in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern, beschrieben durch das Modell aus Abschnitt 2.3.2. Über die Lage der Punkte im Schaubild lässt sich der zugehörige Realteil der Energie eines EP zu (γ_{EP}, f_{EP}) ablesen, der Imaginärteil der Energie ergibt sich aus der farblichen Codierung des jeweiligen Punktes.

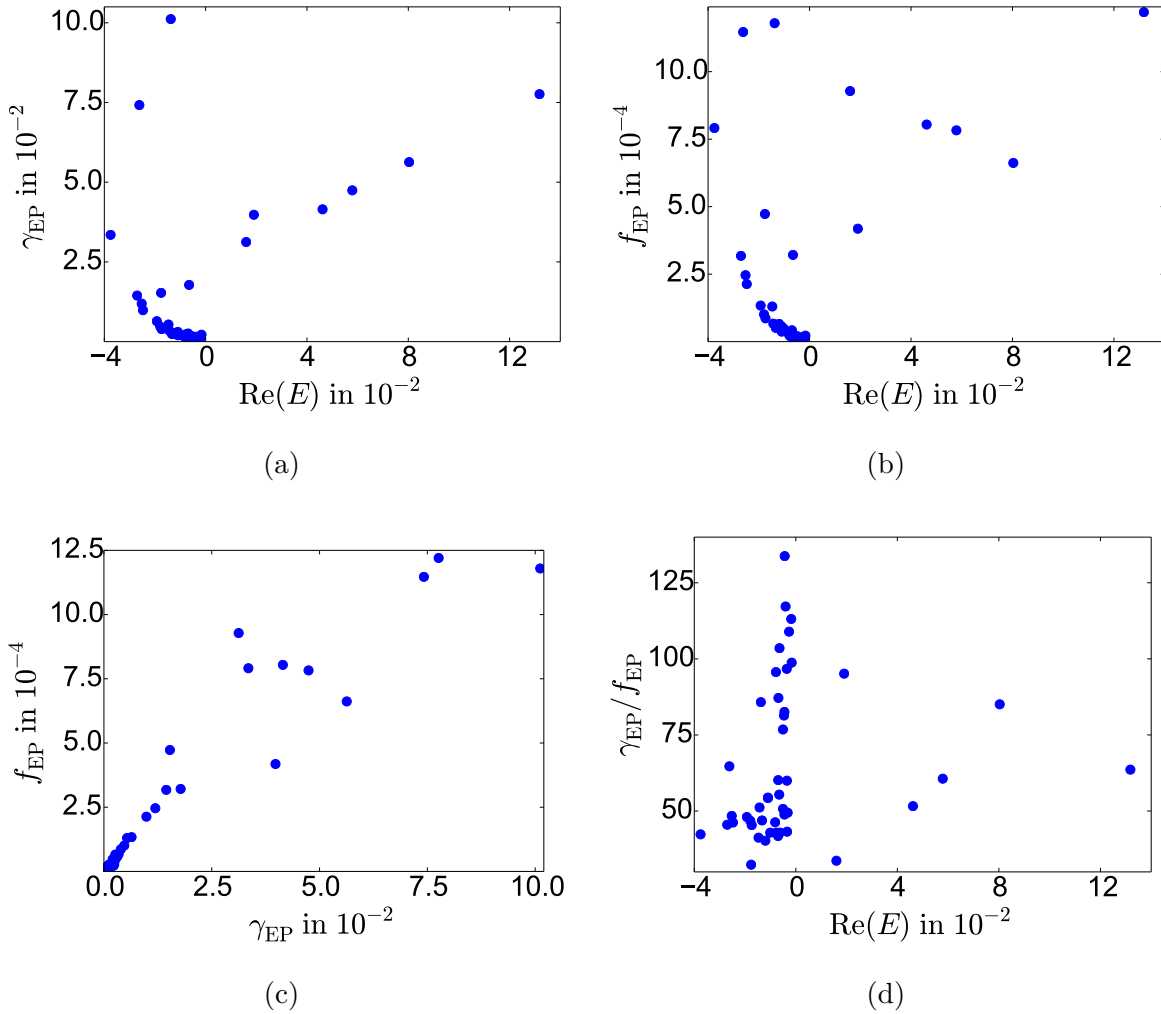


Abbildung 4.13.: Fundorte exzeptioneller Punkte im Rahmen dieser Arbeit. Dabei zeigen a) bis c) zweidimensionale Projektionen aus Abbildung 4.12. In Abbildung d) findet sich eine Auftragung des Verhältnis γ_{EP}/f_{EP} über der reellen Energie der gefundenen EP.

4. Bestimmung der exakten Position eines EP im Parameterraum

Tabelle 4.1.: In Rahmen dieser Arbeit mit Hilfe der Oktagonmethode gefundene und zur Konvergenz gebrachte exzeptionelle Punkte in Hartree-Einheiten (siehe Anhang B).

EP	γ [10^{-3}]	f [10^{-5}]	$\text{Re}(E)$ [10^{-2}]	$\text{Im}(E)$ [10^{-5}]
1	0,226055	0,457030	-0,320478	-0,716874
2	0,304193	0,703986	-0,342679	-1,130270
3	0,410214	0,839901	-0,447452	-1,303138
4	0,619700	0,568846	-0,264424	-0,212603
5	0,760253	0,648645	-0,402611	-0,101072
6	0,842021	1,962895	-0,620253	-3,225076
7	0,846007	1,410755	-0,349890	-2,122072
8	0,859863	2,005076	-0,764764	-0,084618
9	0,869331	1,714772	-0,505151	-0,660290
10	0,875280	1,075542	-0,463897	-0,047545
11	0,976997	2,338645	-0,699709	-0,228187
12	1,039547	1,258731	-0,449214	-0,421932
13	1,183887	0,885054	-0,437284	-0,249923
14	1,224893	1,183358	-0,642269	-0,023338
15	1,261664	2,724735	-0,813213	-4,051234
16	1,317967	1,165235	-0,180779	-11,135069
17	1,529916	1,581905	-0,356194	-22,422871
18	1,607174	2,092840	-0,506002	-0,923619
19	2,008289	3,699965	-1,097234	-4,049517
20	2,033750	4,741013	-1,008081	-7,366199
21	2,172995	2,200364	-0,163052	-2,072308
22	2,269286	2,372457	-0,782542	-1,072215
23	2,378887	5,071741	-1,329859	-0,323238
24	2,387819	2,739422	-0,685886	-0,942211
25	2,539699	4,221796	-0,694216	-3,428939
26	2,639223	6,557072	-1,199629	-0,998142
27	3,045828	5,598038	-1,098741	-0,743496
28	3,402173	6,649608	-1,428150	-7,613100
29	3,913026	8,626964	-1,736860	-0,094169
30	4,717493	10,081340	-1,793671	-1,322806
31	5,366122	13,008660	-1,468341	-1,838136
32	6,410117	13,346690	-1,927787	-16,177670
33	9,854269	21,319640	-2,474504	-2,204625
34	11,913650	24,611370	-2,523520	-8,767382
35	14,452630	31,767360	-2,703665	-41,719790
36	15,297580	47,273020	-1,759468	-44,200140
37	17,788300	32,114240	-0,653430	-80,521610
38	31,246770	92,810210	1,599210	-263,513500
39	33,493240	79,111440	-3,752326	-59,776370
40	39,784214	41,820987	1,903846	-23,158043
41	41,494350	80,411490	4,615522	-45,358940
42	47,449530	78,265950	5,789296	-85,367590
43	56,302360	66,186030	8,032685	-99,992550
44	74,191470	114,683000	-2,617272	-184,842700
45	77,611710	122,031500	13,180220	-252,171000
46	101,164400	117,946200	-1,376392	-184,074500

Tabelle 4.2.: Exzeptionelle Punkte in atomarem Wasserstoff, berechnet nach Anhang B aus den Werten in Tabelle 4.1. Hierbei ist B die magnetische Flussdichte und F die elektrische Feldstärke.

Nr.	B [100 T]	F [10^7 V/m]	$\text{Re}(E)$ [0.1 eV]	$\text{Im}(E)$ [10^{-4} eV]
1	0,531346	0,235014	-0,872066	-1,950713
2	0,715011	0,362004	-0,932476	-3,075621
3	0,964215	0,431894	-1,217579	-3,546019
4	1,456615	0,292512	-0,719533	-0,578523
5	1,786988	0,333546	-1,095561	-0,275030
6	1,979185	1,009361	-1,687793	-8,775878
7	1,988553	0,725439	-0,952098	-5,774452
8	2,021124	1,031051	-2,081028	-0,230258
9	2,043377	0,881771	-1,374586	-1,796740
10	2,057362	0,553066	-1,262328	-0,129377
11	2,296447	1,202580	-1,904006	-0,620927
12	2,443473	0,647266	-1,222374	-1,148134
13	2,782747	0,455113	-1,189911	-0,680075
14	2,879132	0,608507	-1,747703	-0,063506
15	2,965563	1,401115	-2,212865	-11,023968
16	3,097904	0,599188	-0,491923	-30,300064
17	3,596094	0,813448	-0,969253	-61,015734
18	3,777690	1,076182	-1,376902	-2,513295
19	4,720518	1,902598	-2,985726	-11,019296
20	4,780365	2,437927	-2,743128	-20,044447
21	5,107663	1,131473	-0,443688	-5,639037
22	5,333997	1,219966	-2,129406	-2,917645
23	5,591615	2,607994	-3,618730	-0,879575
24	5,612610	1,408667	-1,866390	-2,563886
25	5,969607	2,170935	-1,889058	-9,330618
26	6,203540	3,371782	-3,264357	-2,716083
27	7,159272	2,878627	-2,989826	-2,023156
28	7,996867	3,419366	-3,886194	-20,716299
29	9,197636	4,436163	-4,726236	-0,256246
30	11,088549	5,184033	-4,880827	-3,599538
31	12,613163	6,689321	-3,995559	-5,001822
32	15,067091	6,863143	-5,245775	-44,021679
33	23,162631	10,962999	-6,733468	-5,999090
34	28,003241	12,655674	-6,866847	-23,857260
35	33,971158	16,335432	-7,357047	-113,525322
36	35,957228	24,308762	-4,787756	-120,274698
37	41,811708	16,513805	-1,778073	-219,110444
38	73,446076	47,724925	4,351672	-717,056701
39	78,726443	40,680735	-10,210598	-162,659775
40	93,513486	21,505214	5,180628	-63,016241
41	97,533191	41,349247	12,559474	-123,427953
42	111,530945	40,245966	15,753476	-232,297026
43	132,339676	34,034222	21,858048	-272,093566
44	174,388340	58,972365	-7,121959	-502,982567
45	182,427674	62,751115	35,865203	-686,192189
46	237,788681	60,650370	-3,745353	-500,892188

4. Bestimmung der exakten Position eines EP im Parameterraum

Tabelle 4.3.: Exzeptionelle Punkte in Cu_2O , berechnet nach Anhang B aus den Werten in Tabelle 4.1. Hierbei ist B die magnetische Flussdichte und F die elektrische Feldstärke.

Nr.	B [T]	F [10^3 V/m]	$\text{Re}(E)$ [10^{-4} eV]	$\text{Im}(E)$ [10^{-6} eV]
1	0,136	0,804	-5,891	-1,318
2	0,184	1,239	-6,299	-2,078
3	0,248	1,478	-8,225	-2,396
4	0,374	1,001	-4,861	-0,391
5	0,459	1,142	-7,401	-0,186
6	0,508	3,455	-11,402	-5,929
7	0,510	2,483	-6,432	-3,901
8	0,519	3,529	-14,059	-0,156
9	0,525	3,018	-9,286	-1,214
10	0,528	1,893	-8,528	-0,087
11	0,590	4,116	-12,863	-0,419
12	0,627	2,215	-8,258	-0,776
13	0,714	1,558	-8,039	-0,459
14	0,739	2,083	-11,807	-0,043
15	0,761	4,796	-14,949	-7,447
16	0,795	2,051	-3,323	-20,469
17	0,923	2,784	-6,548	-41,220
18	0,970	3,684	-9,302	-1,698
19	1,212	6,512	-20,170	-7,444
20	1,227	8,345	-18,531	-13,541
21	1,311	3,873	-2,997	-3,809
22	1,369	4,176	-14,385	-1,971
23	1,435	8,927	-24,447	-0,594
24	1,441	4,822	-12,609	-1,732
25	1,532	7,431	-12,762	-6,303
26	1,593	11,541	-22,053	-1,835
27	1,838	9,853	-20,198	-1,367
28	2,053	11,704	-26,253	-13,995
29	2,361	15,184	-31,928	-0,173
30	2,847	17,744	-32,973	-2,432
31	3,238	22,896	-26,992	-3,379
32	3,868	23,491	-35,438	-29,739
33	5,946	37,524	-45,488	-4,053
34	7,189	43,318	-46,389	-16,117
35	8,721	55,913	-49,701	-76,693
36	9,231	83,204	-32,344	-81,252
37	10,734	56,524	-12,012	-148,021
38	18,854	163,354	29,398	-484,412
39	20,210	139,243	-68,978	-109,886
40	24,006	73,608	34,998	-42,571
41	25,038	141,531	84,846	-83,382
42	28,631	137,754	106,423	-156,930
43	33,973	116,493	147,663	-183,814
44	44,767	201,851	-48,113	-339,793
45	46,831	214,785	242,289	-463,561
46	61,043	207,595	-25,302	-338,381

5. Wellenfunktionen in der Nähe eines exzeptionellen Punktes

Im Rahmen der bisherigen Betrachtung eines Exzitons in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern werden lediglich die Energieeigenwerte der verallgemeinerten Eigenwertgleichung (2.39) berücksichtigt. Bei einer Diagonalisierung ergeben sich jedoch auch die Eigenzustände, die ebenfalls zu einer Auswertung herangezogen werden können. Mit ihrer Hilfe lassen sich komplexe Wellenfunktionen errechnen, welche im Betragsquadrat als Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im System interpretiert werden können.

In den nun folgenden Kapiteln wird zuerst eine solche Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung gezeigt und interpretiert. Anschließend folgt eine Diskussion über die Abhängigkeit vom Konvergenzparameter b und dessen optimale Wahl. Mit diesem Wissen lassen sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilungen der beiden an der Bildung eines EP beteiligten Resonanzen in der Nähe desselben graphisch darstellen. Als charakteristisches Unterscheidungsmerkmal stellt sich hier das Muster ihrer Knotenlinien heraus.

Eine wesentliche Eigenschaft exzeptioneller Punkte ist nicht nur das Vertauschungsverhalten der beteiligten Eigenwerte bei einer vollständigen Umkreisung im Parameterraum, sondern auch das hierbei auftretende Vertauschungsverhalten der zugehörigen Eigenfunktionen. Dieses lässt sich in den Knotenlinien der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilungen der jeweiligen Resonanzen wiederfinden und wird im Rahmen dieser Arbeit näher untersucht.

5.1. Visualisierung der Ortsdarstellung einer Resonanz

Nach Abschnitt 2.3.2 ist der Hamiltonoperator (2.29) zylindersymmetrisch, weshalb die verallgemeinerte Eigenwertgleichung (2.39) und die zugehörige Wellenfunktion $\Psi_i(\mu_r, \nu_r, \varphi)$ ebenfalls diese Symmetrie aufweisen. Wie in Abschnitt 2.3.2 erwähnt, eignet sich der rechte obere Quadrant im Raum (μ_r, ν_r) der semiparabolischen Koordinaten besonders gut, um mit Hilfe dieser Symmetrie die Ortsdarstellung der Wellenfunktionen im gesamten kartesischen Raum abzubilden (vgl. Abbildung 2.6). Der Winkel φ kann dabei beliebig (z. B. zu $\varphi = 0$) gewählt werden.

Die Wellenfunktionen $\Psi_i(\mu_r, \nu_r, \varphi)$ und $\Psi_i^*(\mu_r, \nu_r, \varphi)$ werden durch die Gleichungen (2.63) mit Hilfe der Entwicklungskoeffizienten $c_{i,N_\mu,N_\nu,m}$ der Eigenzustände des entsprechenden Eigenwerts E_i bestimmt. Diese ergeben sich aus der Diagonalisierung der verallgemei-

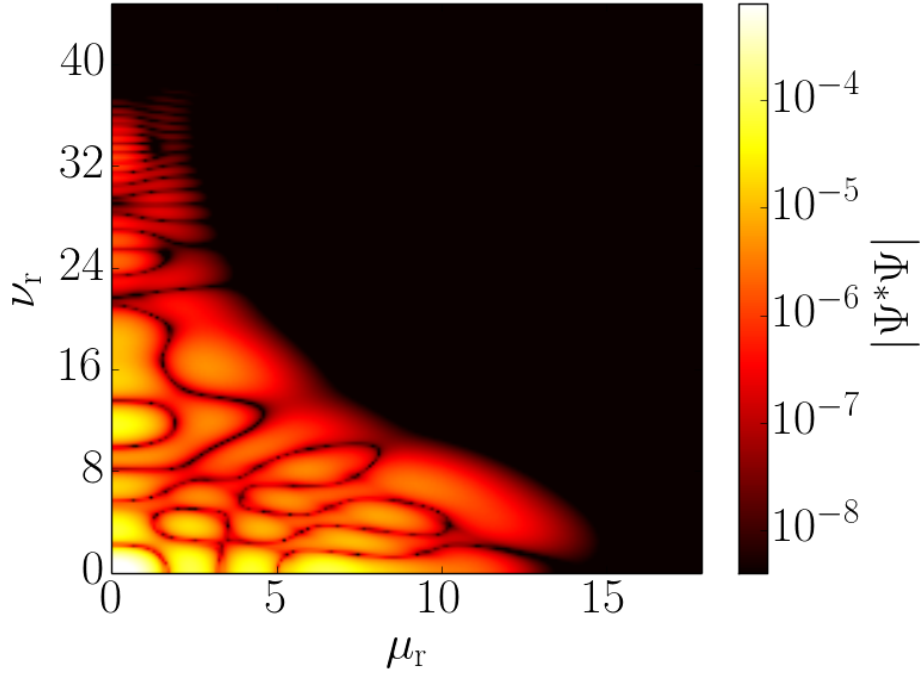


Abbildung 5.1.: Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Psi^*\Psi|$ im Raum (μ_r, ν_r) der (reellen) semiparabolischen Koordinaten für die Wellenfunktion $\Psi(\mu_r, \nu_r, 0)$ einer der beiden Resonanzen des EP aus Gleichung (4.7). Dieser liegt mit der Energie $E_{\text{EP}} = -6,86 \cdot 10^{-3} - 9,44 \cdot 10^{-6}i$ [a.u.] bei den Feldstärken $\gamma_{\text{EP}} = 2,387819 \cdot 10^{-3}$ und $f_{\text{EP}} = 2,739422 \cdot 10^{-5}$. Die dargestellte Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung ist berechnet bei $\gamma = 2,388119 \cdot 10^{-3}$ und $f = f_{\text{EP}}$, wobei der Parameter b der komplexen Rotation zu $b = |b| \exp(i\alpha)$ mit $|b| = 2,6$ und $\alpha = 0,016\pi$ gewählt wurde.

nerten Eigenwertgleichung (2.39). Wie in Abschnitt 2.3.4 diskutiert, folgt aus der Größe $|\Psi_i^* \Psi_i|$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons, welche sich im Raum (μ_r, ν_r) der (reellen) semiparabolischen Koordinaten mit Hilfe einer entsprechenden Farbskala darstellen lässt.

Abbildung 5.1 zeigt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Psi^*(\mu_r, \nu_r, 0) \Psi(\mu_r, \nu_r, 0)|$ im skalierten Raum der semiparabolischen Koordinaten. Die Wellenfunktion $\Psi(\mu_r, \nu_r, 0)$ entstammt dabei einer der beiden Resonanzen des EP aus Gleichung (4.7). Dieser befindet sich bei den Feldstärken $\gamma_{\text{EP}} = 2,387819 \cdot 10^{-3}$ und $f_{\text{EP}} = 2,739422 \cdot 10^{-5}$ und besitzt die komplexe Energie $E_{\text{EP}} = -6,86 \cdot 10^{-3} - 9,44 \cdot 10^{-6}i$ [a.u.]. Die Berechnung der in Abbildung 5.1 gezeigten Darstellung wurde an einem Punkt $\gamma = 2,388119 \cdot 10^{-3}$ und $f = f_{\text{EP}}$ leicht neben dem EP durchgeführt. Als optimaler Konvergenzparameter hat sich dabei $b = |b| \exp(i\alpha)$ mit $|b| = 2,6$ und $\alpha = 0,016\pi$ herausgestellt (siehe hierzu Abschnitt 5.2).

Ein Elektron, beschrieben durch die Wellenfunktion aus Abbildung 5.1, besitzt am Ursprung ($\mu_r = 0, \nu_r = 0$) seine größte Aufenthaltswahrscheinlichkeit, ist jedoch im gesamten farbigen Bereich mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit zu finden. Dieser Bereich ist dabei mit charakteristischen Knotenlinien¹ (siehe hierzu Abschnitt 5.3) durchzogen, an welchen sich die Wahrscheinlichkeit, das Elektron zu finden, deutlich reduziert. In Richtung der μ_r -Achse fällt $|\Psi^* \Psi|$ bei $\mu_r = 15$ auf 10^{-8} mit einer scharfen Begrenzung ab. In Richtung der ν_r -Achse zeigt die Wahrscheinlichkeitsverteilung jedoch keine klare Begrenzung, sondern verliert sich in einem immer feineren Muster aus Knotenlinien. Zur Deutung dieses Umstandes kann Abbildung 2.6 aus Kapitel 2.3.2 zu den semiparabolischen Koordinaten herangezogen werden.

Nach Gleichung (2.29) zeigen beide äußere Felder in die positive z -Richtung. Das elektrische Feld \vec{F} führt auf eine Kraft von $\vec{K} = -e \vec{F}$ auf ein Elektron mit der Elementarladung $-e$, d. h. zu einer Kraft in Richtung der negativen z -Achse. Diese negative z -Achse wird in Abbildung 5.1 durch die ν_r -Achse bei $\mu_r = 0$ dargestellt. Die Wellenfunktion ist hier im Vergleich zur positiven z -Achse (μ_r -Achse bei $\nu_r = 0$) mehr als doppelt so weit ausgedehnt (bis etwa $\mu_r = 36$) und nicht mehr klar begrenzt. Dies lässt sich durch die Kraft auf das Elektron im elektrischen Feld erklären, wodurch es bis zur Ionisationsgrenze aus dem Exziton gezogen wird. In diesem Bereich zeigt Abbildung 5.1 bei ihrer Berechnung jedoch eine starke Abhängigkeit vom Konvergenzparameter b (siehe hierzu Abschnitt 5.2). Zur Auflösung der Wellenfunktion nahe der Ionisationskante wird demnach eine hohe Zahl an Basiszuständen benötigt. Bei einer optimalen Wahl des Konvergenzparameters b kann dies nur durch die Vergrößerung der Basis (d. h. Erhöhung von N_{\max} in Gleichung (2.42)) erreicht werden.

5.2. Abhängigkeit vom Konvergenzparameter

Der Einfluss des Konvergenzparameters auf das Aussehen der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung wird in diesem Kapitel anhand der Wellenfunktion einer Resonanz des EP bei $\gamma_{\text{EP}} = 4,744\,952 \cdot 10^{-2}$ und $f_{\text{EP}} = 7,826\,595 \cdot 10^{-4}$ mit der Energie $E_{\text{EP}} = 5,789 \cdot 10^{-2} - 8,537 \cdot 10^{-4}i$ [a.u.] untersucht. Abbildung 5.2 zeigt die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung einer Resonanz, berechnet bei $\gamma = 4,747\,953 \cdot 10^{-2}$ und $f = f_{\text{EP}}$ mit dem Konvergenzparameter $b = |b| \exp(i\alpha)$ mit der optimalen Wahl $|b| = 1,1$ und $\alpha = 0,025\pi$. Das Konvergenzverhalten hängt maßgeblich von $|b|$ ab. Ist dieser Parameter zu klein gewählt, so wird nur ein kleiner Teil der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung nahe $\mu_r = \nu_r = 0$ richtig aufgelöst und der Rest bleibt hinter unphysikalischen,

¹Achtung bei der Verwendung des Begriffes „Knotenlinie“ in dieser Arbeit:

An den z. B. in Abbildung 5.1 als „Knotenlinien“ bezeichneten Linien ist die Wellenfunktion nicht notwendigerweise Null, sondern lediglich wesentlich kleiner als in der Umgebung. Eigentlich sind Knotenlinien, an welchen eine Wellenfunktion komplett auf Null abfällt, nur im reellen Fall möglich. Für komplexe Wellenfunktionen gibt es allgemein allenfalls Knotenpunkte, da sowohl Real- als auch Imaginärteil zu Null werden müssen.

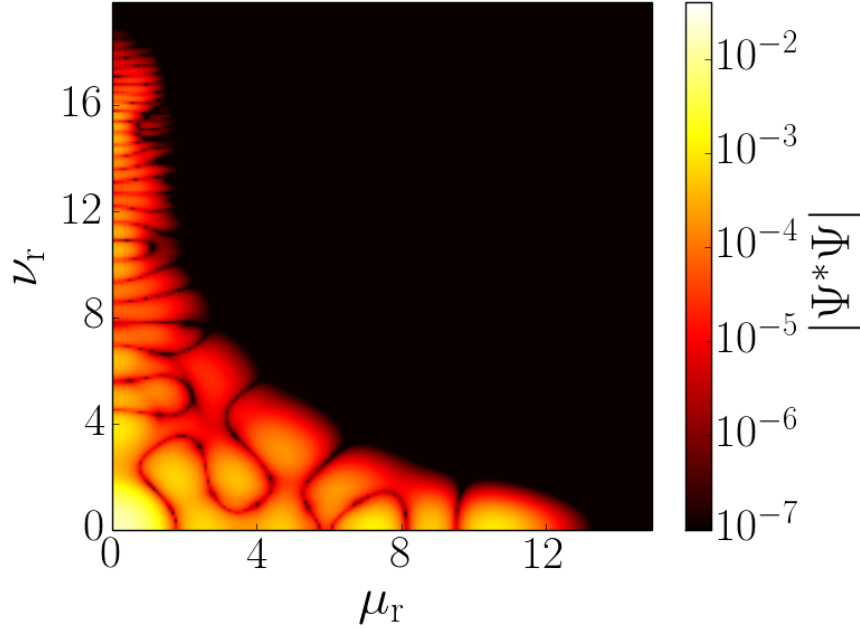


Abbildung 5.2.: Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Psi^*(\mu_r, \nu_r, 0) \Psi(\mu_r, \nu_r, 0)|$ im Raum der (reellen) semiparabolischen Koordinaten für die Wellenfunktion $\Psi(\mu_r, \nu_r, 0)$ einer der beiden Resonanzen eines EP. Dieser liegt mit der Energie $E_{\text{EP}} = 5,789 \cdot 10^{-2} - 8,537 \cdot 10^{-4}i$ [a.u.] bei den Feldstärken $\gamma_{\text{EP}} = 4,744\,953 \cdot 10^{-2}$ und $f_{\text{EP}} = 7,826\,595 \cdot 10^{-4}$. Die dargestellte Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung ist berechnet bei $\gamma = 4,747\,953 \cdot 10^{-2}$ und $f = f_{\text{EP}}$, wobei der Parameter b der komplexen Rotation zu $b = |b| \exp(i\alpha)$ mit $|b| = 1,1$ und $\alpha = 0,025\pi$ gewählt wurde.

nicht konvergierten Lösungen „versteckt“ (siehe Abbildung 5.3a).

Wird ausgehend von dieser Verteilung der Wert von $|b|$ in kleinen Schritten erhöht, so verschwinden die unphysikalischen Teile und die wirkliche Wahrscheinlichkeitsverteilung in Richtung der Ionisationskante wird immer weiter aufgedeckt. Für zu große Werte von $|b|$ entstehen wieder unphysikalische Wahrscheinlichkeitsverteilungen, diesmal jedoch für große μ_r und ν_r , die letztendlich das gesamte Bild überdecken (vgl. Abbildung 5.3b).

Der optimale Wert von $|b|$ findet sich wie folgt

- $|b|$ soll möglichst groß werden, um die Wahrscheinlichkeitsverteilung in Richtung der Ionisationskante möglichst gut aufzulösen.
- $|b|$ muss so klein bleibt, dass die physikalische Verteilung nicht durch unphysikalische Lösungen bei großen μ_r und ν_r verdeckt wird.

Ist der Parameter $|b|$ optimal gewählt, hat α keinen großen Einfluss mehr auf das Aussehen der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung. Die größte Einschränkung ist hier,

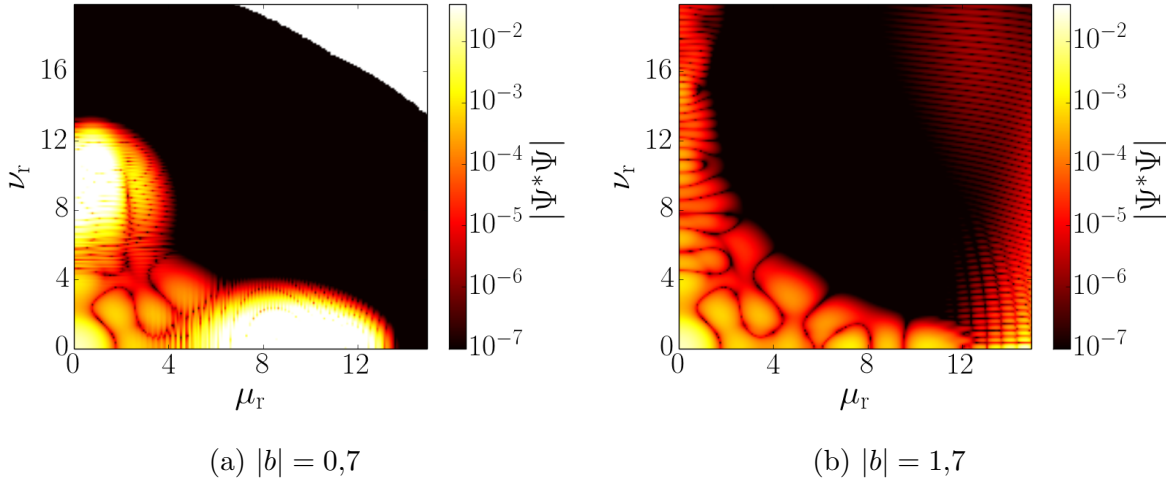


Abbildung 5.3.: Darstellungen der Wahrscheinlichkeitsverteilung aus Abbildung 5.2 bei nicht optimal gewähltem Parameter $|b|$. Der Winkel $\alpha = 0,025\pi$ der komplexen Rotation wurde dabei konstant gehalten. a) Durch einen zu kleinen Wert von $|b| = 0,7$ entstehen unphysikalische Aufenthaltswahrscheinlichkeiten größer eins und die physikalisch richtige Lösung bleibt verdeckt. An den weißen Stellen für große μ_r und ν_r ist die Wellenfunktion numerisch auf Null abgefallen und kann deshalb in der logarithmischen Skala nicht mehr dargestellt werden. b) Durch den zu großen Wert von $|b| = 1,7$ werden zwar im Vergleich zu Abbildung 5.2 mehr Knotenlinien in der Nähe der Ionisationskante sichtbar, gleichzeitig entstehen aber für große Werte von μ_r und ν_r unphysikalische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilungen.

dass α so groß gewählt werden muss, dass die am EP beteiligten Resonanzen aufgedeckt werden (vgl. Abbildung 2.3b). Ein erster Anhaltspunkt zur Wahl von $|b|$ liefert Abbildung 1 in Ref. [21], wonach gilt

$$\sqrt{\frac{32}{35}} \gamma^{-\frac{1}{6}} < |b| < \sqrt{\frac{52}{35}} \gamma^{-\frac{1}{6}} \quad . \quad (5.1)$$

Nach dieser Abschätzung müsste mindestens $|b| = 1,6$ gewählt werden. Bei dieser Wahl ist jedoch schon deutlich die unphysikalische Wellenfunktion aus Abbildung 5.3b erkennbar, weshalb die Schätzung (5.1) nur als Anhaltspunkt gesehen werden kann. Die Feineinstellung von $|b|$ muss durch einen Vergleich von Abbildungen mit verschiedenen Parametern $|b|$ (analog zu den Abbildungen 5.3 und 5.2) erfolgen, wobei sich für die optimale Wahl in dem hier betrachteten Fall ein zu Gleichung (5.1) leicht kleinerer Wert von $|b| = 1,1$ bis $1,2$ ergab.

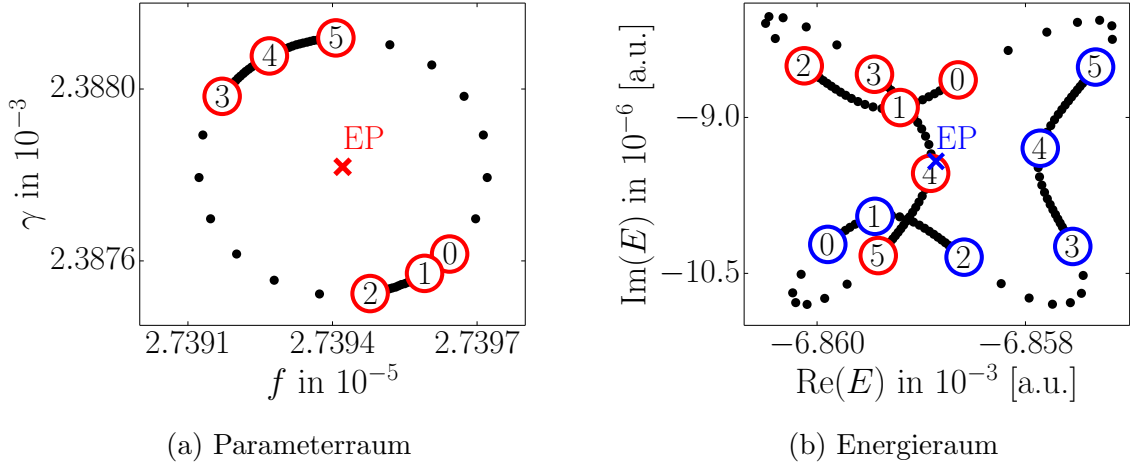


Abbildung 5.4.: a) Umkreisung des EP aus Abbildung 5.1 der Form $f = f_{\text{EP}} + r_f \cos(\varphi)$ und $\gamma = \gamma_{\text{EP}} + r_\gamma \sin(\varphi)$ mit $r_f = 3 \cdot 10^{-9}$ und $r_\gamma = 3 \cdot 10^{-7}$ an diskreten Werten $\varphi \in \{0, 2\pi\}$ (schwarze Punkte), wobei gewissen Bereiche höher aufgelöst wurden. Der Parameter der komplexen Rotation beträgt $b = |b| \exp(i\alpha)$ mit $|b| = 2,6$ und $\alpha = 0,016\pi$. Einige Punkte sind durch eine rote Umrandung hervorgehoben und nummeriert.

b) Schwarze Punkte: beide am EP beteiligte Energieeigenwerte, berechnet für jeden Punkt aus Teil a). Zusätzlich werden für jeden der in Teil a) hervorgehobenen Punkte die beiden zugehörigen Energieeigenwerte mit der selben Nummerierung farblich sortiert dargestellt. Mit einem blauen Kreuz (\times) ist die Position des EP im Energieraum markiert, an welcher die Eigenwerte entarten. Sie liegt in diesem Beispiel sehr nahe an einer der beiden Resonanzen von Punkt vier.

5.3. Vertauschungsverhalten der Wellenfunktionen beim Umkreisen eines EP

Eine charakteristische Eigenschaft eines EP ist nach Abschnitt 2.2.1 das Vertauschungsverhalten der Eigenwerte bei einer vollständigen Umkreisung im Parameterraum. Dieses Vertauschungsverhalten wurde z. B. in Abbildung 3.3 im betrachteten System des Exzitons in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern nachgewiesen. In diesem Kapitel soll nun der Frage nachgegangen werden, ob dieses Vertauschungsverhalten auch in den Wellenfunktionen der beiden am exzeptionellen Punkt beteiligten Resonanzen sichtbar ist. Als Beispiel dient dabei der EP aus Abbildung 5.1.

Abbildung 5.4a zeigt eine Umkreisung des EP bei $\gamma_{\text{EP}} = 2,387819 \cdot 10^{-3}$ und $f_{\text{EP}} = 2,739422 \cdot 10^{-5}$ mit der Energie $E_{\text{EP}} = -6,86 \cdot 10^{-3} - 9,44 \cdot 10^{-6}i$ [a.u.]. Der Pfad um den EP wird dabei beschrieben durch $f = f_{\text{EP}} + r_f \cos(\varphi)$ und $\gamma = \gamma_{\text{EP}} + r_\gamma \sin(\varphi)$ mit

$r_f = 3 \cdot 10^{-9}$ und $r_\gamma = 3 \cdot 10^{-7}$ an diskreten Werten $\varphi \in \{0, 2\pi\}$ (schwarze Punkte). Der Parameter der komplexen Rotation beträgt $b = |b| \exp(i\alpha)$ mit $|b| = 2,6$ und $\alpha = 0,016\pi$. Einige Punkte auf dem Pfad wurden durch eine rote Umrandung optisch hervorgehoben und nummeriert.

Für jeden Punkt im Parameterraum lässt sich die Eigenwertgleichung (2.39) lösen, anschließend können jeweils die beiden zum EP gehörenden Eigenwerte im Energieraum dargestellt werden (siehe schwarze Punkte in Abbildung 5.4b). Die Eigenwerte der hervorgehobenen Parameter aus Abbildung 5.4a sind dabei ebenfalls durch farblich sortierte Umrandungen dargestellt und in gleicher Weise nummeriert. Bei einem vollen Umlauf im Parameterraum vertauschen beide Eigenwerte ihre Position.

Um ein mögliches Vertauschungsverhalten der beiden zum EP gehörenden Eigenfunktionen untersuchen zu können, werden nach Abschnitt 2.3.4 für jeden hervorgehobenen Punkt in Abbildung 5.4a die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilungen beider Zustände berechnet und der Nummerierung entsprechend in den Abbildungen 5.5 und 5.6 dargestellt. Dabei wird die selbe farbliche Sortierung wie in Abbildung 5.4b verwendet, was eine Zuordnung einer jeder Wahrscheinlichkeitsverteilung zu ihrem jeweiligen Eigenwert ermöglicht.

Die Auftragung der beiden zum EP gehörenden Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Eigenzustände im Raum der semiparabolischen Koordinaten erlaubt nun einen Vergleich. Beide Zustände besitzen die selbe Ausdehnung in diesem Raum, begrenzt durch einen scharfen Abfall bei etwa $\mu_r = 15$. Die Ionisationskante wird bis etwa $\nu_r = 36$ aufgelöst. Grundsätzlich unterschieden werden beide Wahrscheinlichkeitsverteilungen durch ihre Knotenlinienstruktur. An Position 0 in Abbildung 5.4a besitzt die als blau markierte Verteilung für kleine Werte von ν_r eine Struktur aus parallelen Knotenlinien, während sich die Struktur der rot markierten Verteilung eher gewunden zeigt.

Bei der Untersuchung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten zeigt sich, dass es nur dann größere Veränderungen im Muster der Knotenlinien von Abbildung 5.5 und 5.6 gibt, wenn der Pfad im Parameterraum nahe am EP verläuft und die beiden Eigenwerte in Abbildung 5.4b nahe beieinander liegen. Der Pfad von Position 0 nach 5 verläuft entfernt vom EP, die Eigenwerte liegen hier energetisch weiter auseinander. Hier verändert sich das Muster der Knotenlinien praktisch nicht.

An Position 1 kommen sich die Eigenwerte in Abbildung 5.4b besonders nahe. Mit anderen Worten: diese Stelle im Parameterraum befindet sich nahe am EP, an welchem die Eigenwerte entarten (Achtung: Abbildung 5.4a besitzt unterschiedlich skalierte Achsen, der Weg um den EP ist demnach stark elliptisch). Das Muster der Knotenlinien zeigt hier eine deutlich andere Struktur als an der Position 0.

An Position 1 sind auch erste Anzeigen der Entartung der Eigenfunktionen am EP zu erkennen. In der mit Blau markierten Verteilung scheint bei etwa ($\mu_r = 4, \nu_r = 12$) das Muster der „roten“ Verteilung durch. Hingegen zeichnet sich bei der „roten“ Verteilung bei etwa ($\mu_r = 5, \nu_r = 6$) das Muster der parallelen Linien der blauen ab.

Die starke Veränderung des Musters aus Knotenlinien ist bis zur Position 2 abgeschlossen, auf dem relativ größeren Pfad nach Position 3 gibt es kaum Veränderungen. Erst auf

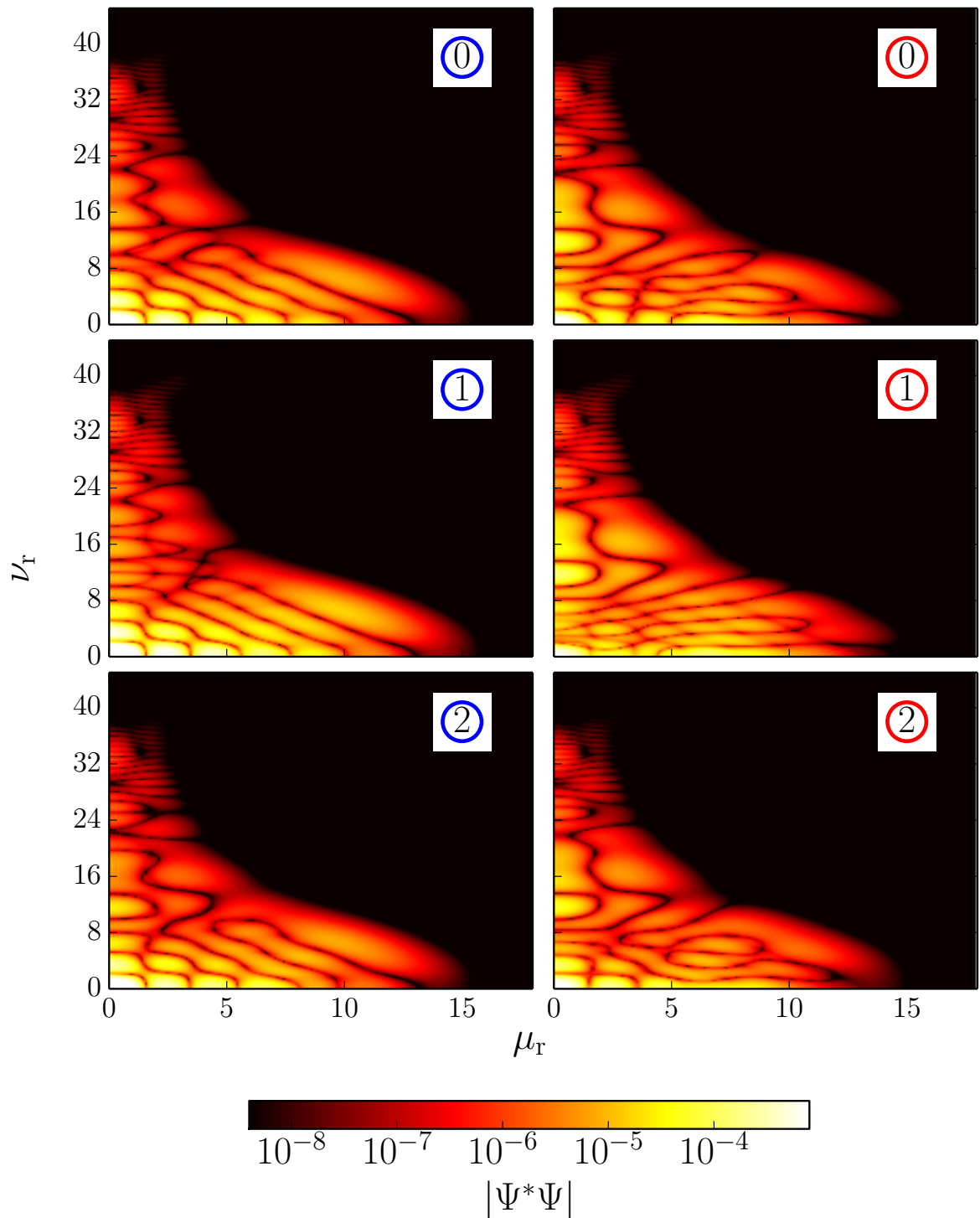


Abbildung 5.5.: Teil Eins der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilungen der beiden zum EP aus Abbildung 5.4a gehörenden Eigenzustände, berechnet an der jeweils durch Nummerierung festgelegten Position im Parameterraum. Die farbliche Umrandung erlaubt die Zuordnung zu den zugehörigen Energieeigenwerten, dargestellt in Abbildung 5.4b.

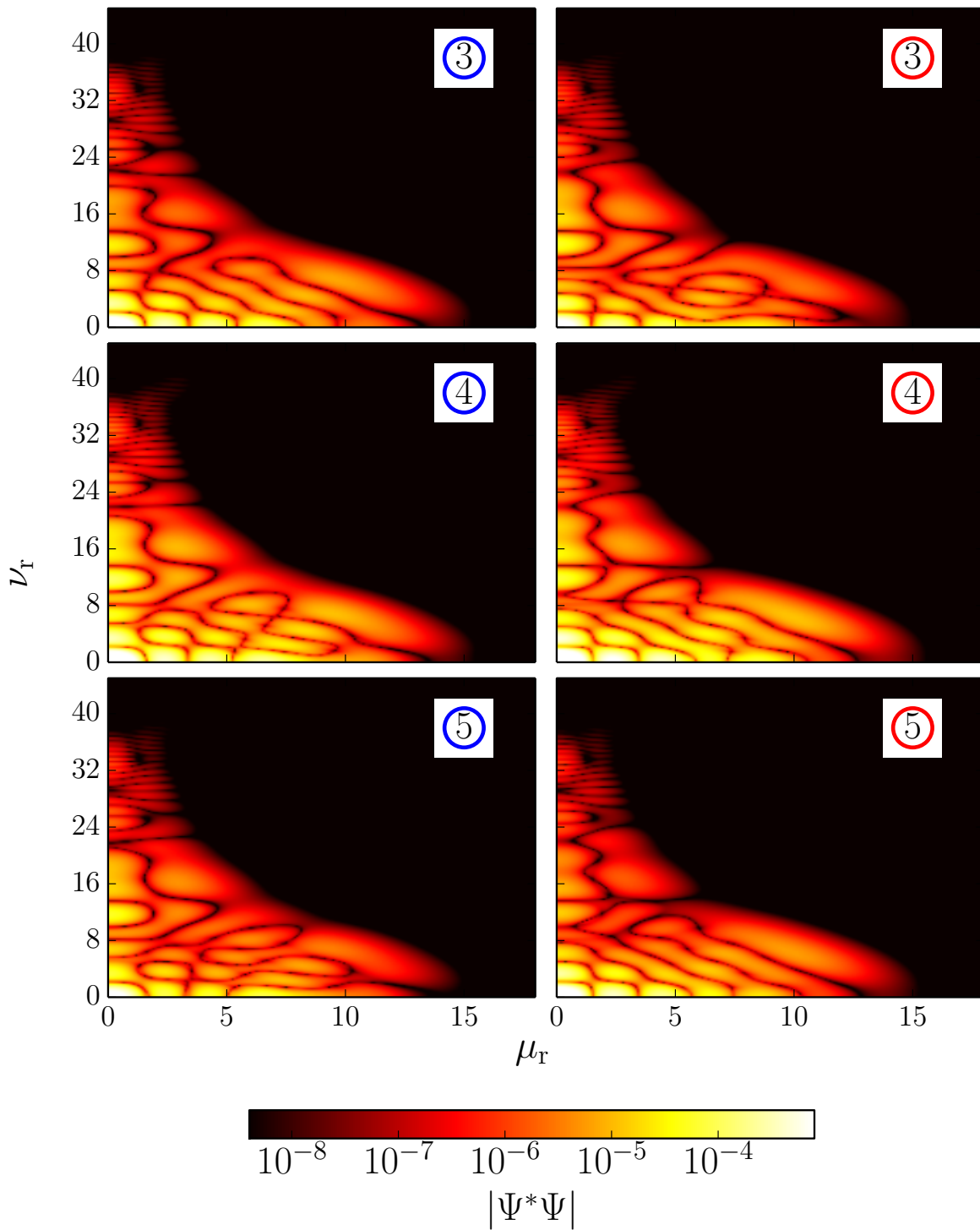


Abbildung 5.6.: Fortsetzung von Abbildung 5.5.

dem Weg von Position 3 nach 5 kommen sich die Eigenwerte ein zweites Mal näher und der Pfad läuft somit noch einmal nahe am EP vorbei. Die Abbildungen bei Position 4 verdeutlichen die große Änderungen im Aussehen der Struktur aus Knotenlinien.

Das Resultat der Untersuchung zeigt sich in den Abbildungen für Position 5. Das Aussehen der Knotenlinien der blau markierten Verteilung hat sich bei einem vollen Umlauf im Parameterraum um den EP von der parallelen, zur gewundenen Struktur verändert. Gleichzeitig wechselt das Aussehen der „roten“ Verteilung von gewunden zu parallel (wie schon angemerkt, zeigt sich beim Pfad von Position 5 nach 0 keine nennenswerte Veränderung mehr). Durch das Vorgehen der vorliegenden Arbeit kann demnach gezeigt werden, dass nicht nur die beiden am EP beteiligten Eigenwerte bei einem vollständigen Umlauf im Parameterraum die Position tauschen, sondern auch die zugehörigen Eigenfunktionen dieses Vertauschungsverhalten in der Struktur ihrer Knotenlinien in den Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilungen besitzen. Erst durch einen zweifachen Umlauf um den EP kehrt das System zu seinem Ausgangszustand zurück.

5.3.1. Videos zum Vertauschungsverhalten

Zur Visualisierung des Vertauschungsverhaltens der zugehörigen Wellenfunktionen bei einer Umkreisung eines exzeptionellen Punktes ist eine Darstellung nach den Abbildungen 5.5 und 5.6 nicht optimal geeignet, um die Übergänge im Muster der Knotenlinien in der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung fließend darzustellen. Dafür wären sehr viel mehr Bilder nötig, weshalb sich hier eine Animation dieses Sachverhalts in einem Video anbietet.

Im Anhang dieser Arbeit findet sich eine CD, auf welcher eine ausgewählte Sammlung dieser Videos für verschiedene EP gespeichert ist. Dazu muss die Umkreisung des EP im Parameterraum in hinreichend kleine Schritte unterteilt werden, wobei die Bereiche starker Änderung der Wellenfunktionen (d. h. dort, wo sich die beiden Resonanzen energetisch sehr nahe kommen) wesentlich feiner zu unterteilen sind. Werden nun diese Bilder zu einem Video zusammengefügt, lässt sich das Vertauschungsverhalten der Wellenfunktionen mit fließenden Übergängen betrachten. Zusätzlich sind jeweils Parameterraum und Energieraum mit vertauschenden, farblich sortierten Eigenwerten abgebildet.

5.4. Visualisierung der Wellenfunktion am EP

Nachdem das Vertauschungsverhalten der beiden Wellenfunktionen eines EP bei dessen Umkreisung im Parameterraum nachgewiesen werden konnte, stellt sich nun die Frage nach dem Aussehen der Wellenfunktion direkt am EP. Nach Abschnitt 2.2.1 entarten an einem exzeptionellen Punkt nicht nur die beiden Eigenwerte, sondern auch die beiden Eigenvektoren. Ein erster Versuch zur Sichtbarmachung dieser Entartung bestand darin, die beiden Wellenfunktionen der Abbildungen 5.5 und 5.6 direkt am zugehörigen EP zu visualisieren.

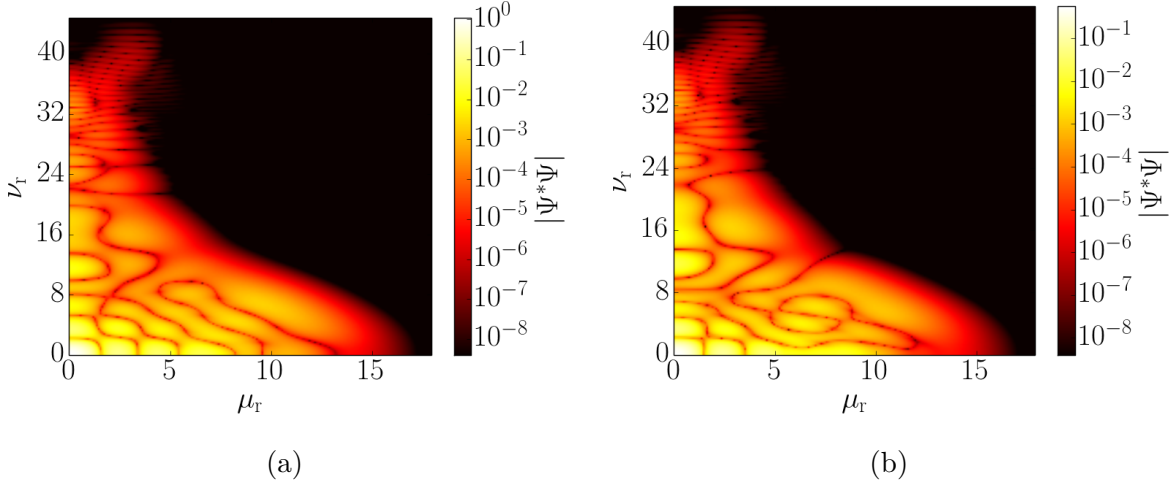


Abbildung 5.7.: Visualisierung der beiden Wellenfunktionen direkt am EP aus Abbildung 5.4. Sie zeigen eine unterschiedliche Knotenlinienstruktur (parallel und gewunden), welche nicht dem erwarteten, gleichen Aussehen aufgrund der Entartung der Eigenfunktionen am EP entspricht. Auffällig ist bei beiden Bildern die Farbskala, welche bis zur Größenordnung eins geht und damit deutlich höhere Werte als in Abbildung 5.1 erreicht.

Die Erwartung, dass beide Wellenfunktionen hier gleich oder zumindest sehr ähnlich aussehen, lässt sich mit diesem Verfahren jedoch nicht bestätigen. Die zwei resultierenden Wellenfunktionen zeigen hier unterschiedliches Aussehen – einmal eine gewundene und einmal eine parallele Knotenlinienstruktur (siehe Abbildung 5.7). Der Grund dafür lässt sich durch Abbildung 4.8 erklären. Am EP ist die betragsmäßige Differenz der Eigenwerte $\sqrt{|\eta|}$ auf etwa 10^{-10} [a.u.] abgefallen. Dieser Wert ist zwar klein, aber noch nicht numerisch Null. Das vorgestellte Verfahren erlaubt es demnach nicht, die Entartung der Eigenwerte am EP vollständig aufzulösen. Das gleiche Problem ergibt sich für die beiden zugehörigen Eigenvektoren, welche numerisch nicht zur vollständigen Entartung gebracht werden können.

Auffällig ist die Betrachtung der beiden Farbskalen in Abbildung 5.7. Sie erstrecken sich bis zu einem maximalen Wert der Größenordnung Eins, weitaus größer als beispielsweise in Abbildung 5.1. Der Grund hierfür liegt in der Normierung der beiden am EP beteiligten Eigenvektoren $|v_1\rangle$ und $|v_2\rangle$. Im Rahmen der numerischen Lösung von Gleichung (2.39) werden diese im allgemeinen Fall bei der Diagonalisierung so bestimmt, dass

$$\langle v_1 | v_1 \rangle = \langle v_2 | v_2 \rangle = 1 \quad (5.2a)$$

$$\langle v_1 | v_2 \rangle = 0 \quad (5.2b)$$

gilt. Direkt am EP entarten die Eigenvektoren $|v_1\rangle = |v_2\rangle$ jedoch, wodurch

$$\langle v_1 | v_2 \rangle = 1 \quad (5.3)$$

gelten würde. Dieser Widerspruch führt aufgrund der endlichen numerischen Genauigkeit zu Fehlern und Divergenzen, einerseits in der Normierung, andererseits in der Farbskala. Verdeutlichen lassen sich diese Divergenzen mit den Eigenvektoren des einfachen Matrixmodells aus Gleichung (2.21). Diese besitzen direkt am EP die Norm Null und sind somit nicht normierbar. Bei einer langsamen Annäherung an den EP würden auch diese Eigenvektoren beim Versuch einer Normierung immer mehr divergieren. Die Divergenz der Farbskala ist somit ein weiteres Maß dafür, wie nahe der Schätzwert für einen EP am tatsächlichen EP liegt.

Um eine Abschätzung für die Visualisierung der Wellenfunktion direkt am exzeptionellen Punkt treffen zu können, soll an dieser Stelle die Abschätzung für die vermutliche Position $E_{\text{EP,guess}}$ des EP nach Abschnitt 4.3.2 herangezogen werden, wonach nahe am EP näherungsweise

$$E_{\text{EP,guess}} = \frac{E_1 + E_2}{2} \quad (5.4)$$

gilt. Dabei sind E_1 und E_2 die beiden am EP beteiligten Eigenwerte. Nach Abbildung 4.8 konvergiert diese Abschätzung während den Iterationsschritten auf Maschinengenauigkeit und ist damit deutlich genauer, als sich die Entartung der beiden Energieeigenwerte ausrechnen lässt.

Durch dieses Vorgehen motiviert, lässt sich der Eigenvektor $|v_{\text{EP}}\rangle$ ebenfalls durch die beiden (noch nicht ganz entarteten) Eigenvektoren $|v_1\rangle$ und $|v_2\rangle$ am EP abschätzen

$$|v_{\text{EP}}\rangle_{\text{guess}} = \frac{|v_1\rangle + |v_2\rangle}{2} \quad (5.5)$$

Werden nun zu Abbildung 5.7 analoge Bilder am EP mit den beiden Eigenvektoren $|v_1\rangle = |v_2\rangle = |v_{\text{EP}}\rangle_{\text{guess}}$ errechnet, so entstehen zwei völlig gleiche Abbildungen. Eine davon ist in Abbildung 5.8 dargestellt, welche somit als Abschätzung für die Visualisierung der Wellenfunktion direkt am EP gilt. Ein Blick auf die Farbskala zeigt, dass diese hierdurch noch einmal um einen Faktor Zehn angestiegen ist und nun im Vergleich zu Abbildung 5.1 volle fünf Größenordnungen höher liegt. Abbildung 5.8 zeigt demnach eine Wellenfunktion, die der wirklichen am EP sehr nahe kommt.

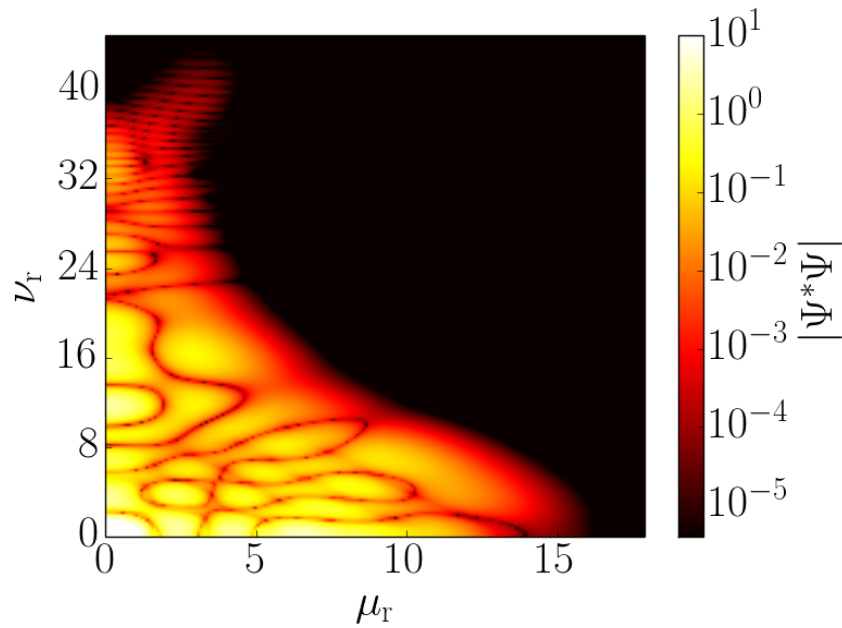


Abbildung 5.8.: Visualisierung einer Abschätzung für die entartete Wellenfunktion direkt am EP aus Abbildung 5.4. Hierzu wurden die nach Gleichung (5.5) abgeschätzten Eigenvektoren $|v_1\rangle = |v_2\rangle = |v_{\text{EP}}\rangle_{\text{guess}}$ verwendet. Die Farbskala liegt hier um fünf Größenordnungen höher, verglichen mit Abbildung 5.1, ein Hinweis, dass diese Wellenfunktion der tatsächlichen am EP sehr nahe kommt. Direkt am EP würde die Wellenfunktion aufgrund seiner singulären Struktur divergieren.

6. Zusammenfassung und Ausblick

Nachdem im Wasserstoffatom in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern im Rahmen einer Doktorarbeit von Holger Cartarius das Auftreten exzeptioneller Punkte bestätigt wurde [6], bestand in der Folge die erste Aufgabe der vorliegenden Masterarbeit darin, diese bei Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern ebenfalls zu finden. Mit Hilfe der numerischen Lösung einer Eigenwertgleichung im Rahmen der wasserstoffartigen Beschreibung eines Exzitons wurde zuallererst das Auftreten von Resonanzen, d. h. metastabilen Zuständen verifiziert. Durch die Auftragung des Realteils der Energie einer größeren Anzahl dieser Resonanzen bei verschiedenen äußeren Feldstärken konnten vermiedene Kreuzungen zwischen diesen Zuständen nachgewiesen werden. Sie dienten dabei als Ausgangspunkt für die Suche nach exzeptionellen Punkten. Der eigentliche Nachweis ihrer Existenz folgte dann über das Vertauschungsverhalten der Eigenwerte bei adiabatischer Umkreisung des jeweiligen EP im Parameterraum, welcher durch die Stärke der beiden äußeren Felder aufgespannt wird.

Nachdem das Auftreten von exzeptionellen Punkten im betrachteten System nachgewiesen werden konnte, stellte sich die Frage nach ihrer exakten Position in Parameter- und Energieraum. Ausgehend von einem zweidimensionalen Matrixmodell zur Beschreibung der beiden an der Bildung eines EP beteiligten Zustände ergab sich im Rahmen einer linearen Näherung in den Feldstärken die Dreipunktmethode von Uzdin *et al* [7], die es erlaubte, diese exakte Position in einigen Fällen zu bestimmen. In den meisten Fällen war dies so jedoch nicht oder nur mit großem numerischem Aufwand möglich. Aus diesem Grund war es naheliegend, unter Hinzunahme der Terme quadratischer Ordnung in den äußeren Feldstärken eine neue Methode zum Auffinden der exakten Position eines EP in Parameter- und Energieraum zu entwickeln.

Bei dieser sog. Oktagonmethode muss die quantenmechanische Eigenwertgleichung lediglich an den acht Eckpunkten eines Oktagons, sowie an dessen Mittelpunkt gelöst werden. Alle weiteren Charakteristika, wie z. B. die Pfade der Eigenwerte im Energieraum bei adiabatischer Umfahrung auf dem Umkreis des Oktagons im Parameterraum, lassen sich über das zweidimensionale Matrixmodell bestimmen. So ist z. B. zur Betrachtung des Vertauschungsverhaltens der Eigenwerte als Nachweis für einen EP keine aufwendige Rechnung mit einer großen Anzahl an Schritten mehr nötig, die quantenmechanische Rechnung an den neun Oktagonpunkten genügt.

Mit Hilfe der Oktagonmethode findet sich ein iterativer Algorithmus, ähnlich einem Newtonverfahren, durch welchen sich die exakte Position des EP in Parameter- und Energieraum mit hoher Präzision bestimmen lässt. Die Oktagonmethode erwies sich als deutlich stabiler als die Dreipunktmethode. So genügten hier zur Konvergenz an die

exakte Position des EP meist die groben Parameter einer vermiedenen Kreuzung. Die Tatsache, dass die Struktur eines EP über das zweidimensionale Matrixmodell mit in die Oktagonmethode eingeht und somit die quantenmechanische Rechnung an nur wenigen Punkten durchgeführt werden muss, verringert den Zeitaufwand eines Iterationsschrittes auf etwa eine Minute, sofern die Rechnungen parallel ausgeführt werden.

Der Preis höherer Genauigkeit der Oktagonmethode wird allerdings dadurch gezahlt, dass im Gegensatz zur Dreipunktmethode die Eindeutigkeit der Lösung eines Iterationsschrittes verloren geht. Im schlimmsten Fall muss aus vier verschiedenen Lösungen die richtige ausgewählt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde dieses Problem ebenfalls gelöst, wobei die Auswahl der richtigen Lösung ohne quantenmechanische Rechnung auskommt und somit den Algorithmus nicht nennenswert verlangsamt.

Durch die Berechnungen mit der Oktagonmethode wurden in der vorliegenden Masterarbeit beim Exziton in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern über 45 verschiedene EP gefunden, welche für höhere Feldstärken auch oberhalb der Ionisationskante (definiert als Nullenergie bei Abwesenheit externer Felder) auftreten können. Im Gegensatz zu den EP in atomarem Wasserstoff liegen im Falle von Cu_2O ein Großteil der gefundenen EP in einem experimentell zugänglichen Parameterbereich, wodurch die experimentelle Überprüfung der theoretischen Vorhersagen dieser Arbeit möglich ist.

Im letzten großen Abschnitt der Masterarbeit sollten die Wellenfunktionen von an der Bildung eines EP beteiligten Resonanzen näher untersucht werden. Dazu wurde die Ortsdarstellung einer solchen Wellenfunktion durch eine der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons entsprechende Größe im Raum der semiparabolischen Koordinaten für verschiedene Konvergenzparameter diskutiert. Anschließend konnte das Vertauschungsverhalten nicht nur der Eigenwerte, sondern auch der zugehörigen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten (und somit Wellenfunktionen) der Eigenzustände bei adiabatischer Umkreisung um den EP im Parameterraum sowohl im Rahmen einer Bilderserie, als auch durch ein Video, nachgewiesen werden. Für beide am EP beteiligten Resonanzen unterscheidet sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung durch charakteristische Knotenlinien, welche ihre Struktur bei einem vollen Umlauf im Parameterraum gerade vertauschen.

Anschließend wurde versucht, die Wellenfunktionen und ihre Entartung direkt am EP zu visualisieren. Aufgrund einer widersprüchlichen Normierungsbedingung war dies durch einfache Rechnung nicht möglich. Über die Mittlung der beiden zum EP gehörenden Eigenvektoren konnte letztendlich trotzdem ein Schätzwert für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung direkt am EP gegeben werden.

Für zukünftige Forschungen verbleiben noch einige ungelöste Aufgaben. Auf der einen Seite besteht die Möglichkeit, die theoretischen Vorhersagen dieser Arbeit im Experiment zu überprüfen. Da die gefundenen EP im Falle von atomarem Wasserstoff nicht im experimentell zugänglichen Bereich liegen muss hierbei mit Exzitonen im Festkörper (z.B. Cu_2O nach Ref. [1]) gearbeitet werden. Hierzu könnten Photoabsorptionsspektren der an einem EP beteiligten Zustände bei seiner adiabatischen Umkreisung aufgenommen werden. Diese lassen sich anschließend mit der Methode der harmonischen Inversion

nach Ref. [22] untersuchen. Durch eine Erweiterung dieser Methode in Ref. [23] wäre eine Untersuchung auch direkt am EP denkbar. Auf theoretischer Seite bietet sich die Möglichkeit, das Modell der wasserstoffartigen Beschreibung eines Exzitons unter Zuhilfenahme verschiedener Effekte im Festkörper noch weiter zu verfeinern. So könnte z. B. eine komplexere Bandstruktur mit mehr als einem Valenz- und Leitungsband betrachtet werden. Eine andere Möglichkeit stellt die Berücksichtigung von Austausch- und Korrelationseffekten nach Ref. [11] oder die Wechselwirkung des Exzitons mit den Phononen im Festkörper dar.

A. Zweidimensionaler harmonischer Oszillator

In kartesischen Koordinaten lautet der Hamiltonoperator des zweidimensionalen harmonischen Oszillators

$$H = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2} (x_1^2 + x_2^2) = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) + \frac{1}{2} (x_1^2 + x_2^2) \quad . \quad (\text{A.1})$$

Die zugehörige Schrödingergleichung lässt sich in den Koordinaten x_1 und x_2 trennen und durch die Einführung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_i + ip_i) \quad , \quad a_i^+ = \frac{1}{2} (x_i - ip_i) \quad (\text{A.2})$$

wie im eindimensionalen Fall lösen. Mit Hilfe der Operatoren (A.2) lässt sich der Hamiltonoperator in die Form

$$H = \left(a_1^+ a_1 + \frac{1}{2} \right) + \left(a_2^+ a_2 + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{A.3})$$

bringen. Die Eigenzustände mit den Besetzungszahlen $n_i \in \mathbb{N}_0$ lauten $|n_1, n_2\rangle$ wobei gilt

$$H |n_1, n_2\rangle = (n_1 + n_2 + 1) |n_1, n_2\rangle \quad . \quad (\text{A.4})$$

Im zweidimensionalen Fall ist der Drehimpuls

$$L = x_1 p_2 - p_1 x_2 \quad (\text{A.5})$$

eine Konstante der Bewegung, weshalb sich neben den Besetzungszahloperatoren $\hat{n}_i = a_i^+ a_i$ ein anderer vollständiger Satz kommutierender Observablen finden lässt. Die Argumentation folgt dabei dem Vorgehen in [24]. Mit Hilfe der Operatoren aus Gleichung (A.2) lassen sich neue Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren definieren

$$A_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1 \mp ia_2) \quad , \quad (\text{A.6a})$$

$$A_{\pm}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1^+ \pm ia_2^+) \quad , \quad (\text{A.6b})$$

A. Zweidimensionaler harmonischer Oszillator

welche die selben Vertauschungsrelationen erfüllen

$$[A_r, A_s] = [A_r^+, A_s^+] = 0 \quad , \quad (\text{A.7a})$$

$$[A_r, A_s^+] = \delta_{r,s} \quad . \quad (\text{A.7b})$$

Hierbei bezeichnet $\delta_{r,s}$ das Kronecker-Delta, das für $r = s$ gleich Eins ist und Null sonst. Nun lassen sich neue Besetzungszahloperatoren $\hat{n}_\pm = A_\pm^+ A_\pm$ definieren. Die Eigenzustände des Hamiltonoperators lauten analog zum obigen Fall $|n_+, n_-\rangle$ mit den Besetzungszahlen $n_\pm \in \mathbb{N}_0$ der „ \pm -Quanten“. Durch Linearkombination der Operatoren \hat{n}_\pm ergeben sich zwei kommutierende Observablen, die Gesamtbesetzungszahl¹

$$N = \hat{n}_+ + \hat{n}_- \quad (\text{A.8})$$

und der Drehimpuls

$$L = \hat{n}_+ - \hat{n}_- \quad . \quad (\text{A.9})$$

Für diese Operatoren gelten die folgenden Vertauschungsrelationen

$$[L, A_\pm] = \mp A_\pm \quad , \quad (\text{A.10a})$$

$$[L, A_\pm^+] = \pm A_\pm^+ \quad , \quad (\text{A.10b})$$

$$[N, A_\pm] = -A_\pm \quad , \quad (\text{A.10c})$$

$$[N, A_\pm^+] = A_\pm^+ \quad . \quad (\text{A.10d})$$

Weiterhin ergeben sich die Eigenwertgleichungen

$$N |n_+, n_-\rangle = (n_+ + n_-) |n_+, n_-\rangle \quad , \quad (\text{A.11})$$

$$L |n_+, n_-\rangle = (n_+ - n_-) |n_+, n_-\rangle \quad , \quad (\text{A.12})$$

$$H |n_+, n_-\rangle = (n_+ + n_- + 1) |n_+, n_-\rangle \quad . \quad (\text{A.13})$$

Alternativ zu den Besetzungszahlen n_\pm kann auch die Gesamtbesetzungszahl

$$n = (n_+ + n_-) \in \mathbb{N}_0 \quad (\text{A.14})$$

und die Drehimpulsquantenzahl

$$m = (n_+ - n_-) \in \mathbb{Z} \quad (\text{A.15})$$

eingeführt werden, wobei gilt

$$H |n, m\rangle = (n + 1) |n, m\rangle \quad , \quad (\text{A.16})$$

$$L |n, m\rangle = m |n, m\rangle \quad . \quad (\text{A.17})$$

¹Dabei gilt $N = \hat{n}_+ + \hat{n}_- = \hat{n}_1 + \hat{n}_2$.

Nach [6] ergibt die Anwendung der Operatoren A_{\pm} und A_{\pm}^{\dagger} auf die $|n, m\rangle$ Zustände

$$A_{\pm} |n, m\rangle = \pm \sqrt{\frac{n \pm m}{2}} |n - 1, m \mp 1\rangle \quad , \quad (\text{A.18a})$$

$$A_{\pm}^{\dagger} |n, m\rangle = \pm \sqrt{\frac{n \pm m}{2} + 1} |n + 1, m \pm 1\rangle \quad . \quad (\text{A.18b})$$

Soll die Schrödingergleichung des zweidimensionalen, harmonischen Oszillators in Polarkoordinaten gelöst werden, so stellen die Zustände $|n, m\rangle$ eine geeignete Basis dar. Wird die Transformation

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho \cos(\varphi) \\ \rho \sin(\varphi) \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

in die Gleichungen (A.1) und (A.5) eingesetzt, so folgt²

$$H = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{1}{2} \rho^2 \quad , \quad (\text{A.20})$$

$$L = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad . \quad (\text{A.21})$$

Ein Vergleich zu den Operatoren H_{μ} und H_{ν} in Gleichung (2.38) zeigt, dass der Hamiltonoperator (A.20) die selbe Form besitzt. Gleichung (2.38) beinhaltet demnach zwei zweidimensionale harmonische Oszillatoren der Form (A.20), die aufgrund der Erhaltung des Drehimpulses bei einem Wasserstoffatom in parallelen Feldern die selbe Variable φ und somit die selbe Drehimpulsquantenzahl m besitzen. Aus diesem Grund empfiehlt es sich, eine geeignete Sortierung der Zustände für feste Werte von m zu finden.

Nach Abbildung A.1 kann eine Quantenzahl $N_{\rho} \in \mathbb{N}_0$ mit $\rho \in \{\mu, \nu\}$ definiert werden, welche für $m < 0$ mit n_+ und für $m > 0$ mit n_- des jeweiligen Oszillators übereinstimmt³. Anstelle Gleichung (A.14) lässt sich folglich auch definieren

$$n_+ + n_- = 2N_{\rho} + |m| \quad . \quad (\text{A.22})$$

Mit Hilfe von Gleichung (A.15) ergeben sich die folgenden Beziehungen

$$n_+ = N_{\rho} + \frac{|m| + m}{2} \quad , \quad (\text{A.23})$$

$$n_- = N_{\rho} + \frac{|m| - m}{2} \quad . \quad (\text{A.24})$$

²Dabei lässt sich ausnutzen, dass $L_z^2 = \rho^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2$ ist, d. h. der zweidimensionale Spezialfall der (dreidimensionalen) Relation $\vec{p}^2 = p_r^2 + \vec{L}^2/r^2$ mit dem Radialimpuls $p_r = -i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$.

³Die Unterscheidung nach ρ wird an dieser Stelle wichtig, da jeder der beiden zweidimensionalen harmonischen Oszillatoren eigene „ \pm -Quanten“ besitzt.

A. Zweidimensionaler harmonischer Oszillator

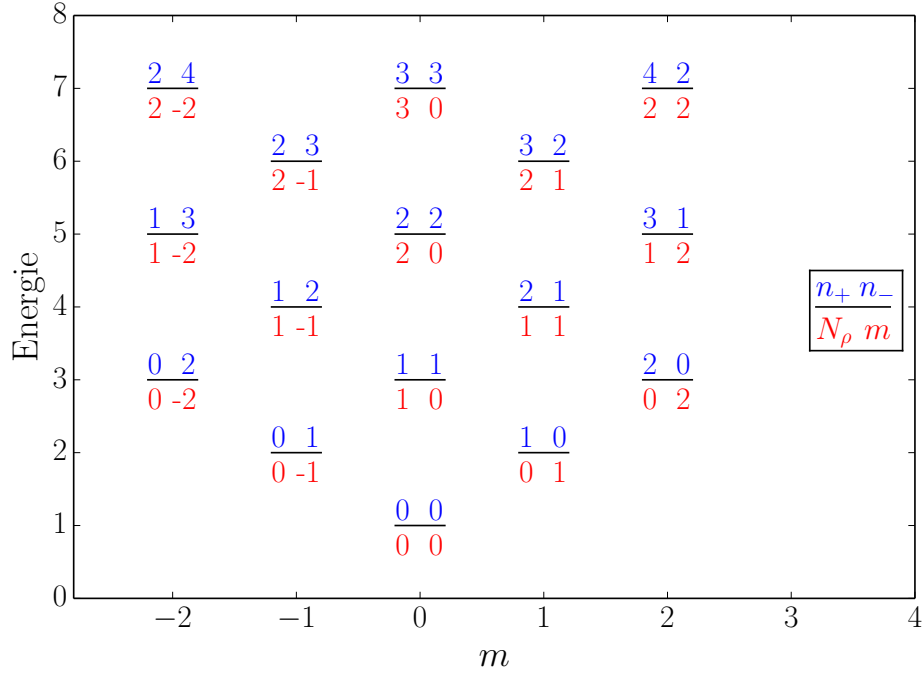


Abbildung A.1.: Verschiedene Möglichkeiten für die Benennung der Energieniveaus mit Quantenzahlen. Nach Gleichung (A.22) lassen sich n_+ und n_- in N_ρ und m umschreiben, wobei $m = n_+ - n_-$ gilt.

An dieser Stelle ist anzumerken, dass sich nach [25] die zugehörigen neuen Eigenzustände $|N_\rho, m\rangle$ auch als Eigenzustände eines Satzes hermitescher Operatoren

$$S_x = \frac{1}{4} \left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} - \rho^2 \right) \quad , \quad (\text{A.25a})$$

$$S_y = -\frac{i}{2} \left(1 + \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \quad , \quad (\text{A.25b})$$

$$S_z = \frac{1}{4} \left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} + \rho^2 \right) \quad (\text{A.25c})$$

ergeben, welche einer SO(2,1)-Algebra gehorchen

$$[S_x, S_y] = -iS_z \quad , \quad (\text{A.26a})$$

$$[S_y, S_z] = iS_x \quad , \quad (\text{A.26b})$$

$$[S_z, S_x] = iS_y \quad . \quad (\text{A.26c})$$

Für die Wirkung dieser Operatoren auf die Eigenzustände $|N_\rho, m\rangle$ gilt

$$S_z |N_\rho, m\rangle = \frac{1}{2} (2N_\rho + |m| + 1) |N_\rho, m\rangle \quad , \quad (\text{A.27a})$$

$$S_+ |N_\rho, m\rangle = -\sqrt{(N_\rho + |m| + 1)(N_\rho + 1)} |N_\rho + 1, m\rangle \quad , \quad (\text{A.27b})$$

$$S_- |N_\rho, m\rangle = -\sqrt{N_\rho(N_\rho + |m|)} |N_\rho - 1, m\rangle \quad , \quad (\text{A.27c})$$

$$S^2 |N_\rho, m\rangle = \frac{1 - m^2}{4} |N_\rho, m\rangle \quad . \quad (\text{A.27d})$$

Hierbei wurden die Leiteroperatoren $S_\pm = S_x \pm iS_y$ sowie der Casimiroperator verwendet

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 - S_z^2 = \frac{1 - m^2}{4} \quad . \quad (\text{A.28})$$

Ein Vergleich der Gleichungen (A.20) und (A.25c) zeigt, dass durch Trennung des Winkelanteils in der Schrödingergleichung $H\Psi = E\Psi$ sich

$$\Psi(\rho, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \psi(\rho) e^{im\varphi} \quad (\text{A.29})$$

schreiben lässt als

$$2S_z \psi = E\psi \quad . \quad (\text{A.30})$$

Die für die Matrixdarstellung der Schrödingergleichung (2.39) benötigten Relationen ergeben sich nach [25] aus obigen Überlegungen zu

$$H_\rho |N_\rho, m\rangle = (2N_\rho + |m| + 1) |N_\rho, m\rangle \quad , \quad (\text{A.31a})$$

$$L |N_\rho, m\rangle = m |N_\rho, m\rangle \quad (\text{A.31b})$$

$$\begin{aligned} \rho^2 |N_\rho, m\rangle = & -\sqrt{N_\rho(N_\rho + |m|)} |N_\rho - 1, m\rangle \quad , \\ & + (2N_\rho + |m| + 1) |N_\rho, m\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.31c})$$

$$\begin{aligned} \rho^4 |N_\rho, m\rangle = & +\sqrt{(N_\rho - 1)N_\rho(N_\rho + |m| - 1)(N_\rho + |m|)} |N_\rho - 2, m\rangle \\ & - 2(2N_\rho + |m|) \sqrt{N_\rho(N_\rho + |m|)} |N_\rho - 1, m\rangle \\ & + [(2N_\rho + |m| + 1)(2N_\rho + |m| + 2) + 2N_\rho(N_\rho + |m|)] |N_\rho, m\rangle \quad (\text{A.31d}) \\ & - 2(2N_\rho + |m| + 2) \sqrt{(N_\rho + 1)(N_\rho + |m| + 1)} |N_\rho + 1, m\rangle \\ & + \sqrt{(N_\rho + 1)(N_\rho + 1)(N_\rho + |m| + 1)(N_\rho + |m| + 2)} |N_\rho + 2, m\rangle \quad . \end{aligned}$$

B. Hartree-Einheiten

Zur Festlegung der Hartree-Einheiten werden vier Definitionen benötigt, die sich durch die folgenden Punkte ausdrücken lassen:

1. Einheit der Masse ist die Masse m_e eines Elektrons.
2. Ladungen werden in Einheiten der Elementarladung e gemessen.
3. Die Einheit des Drehmoments ist das reduzierten Planck'schen Wirkungsquantum $\hbar = h/(2\pi)$.
4. Längen werden in Einheiten des Bohrschen Radius $a_0 = 4\pi \varepsilon_0 \hbar^2 / (m_e e^2)$ gemessen.

Formal werden die Hartree-Einheiten oft durch Setzen von $\hbar = 4\pi \varepsilon_0 = m_e = e = 1$ eingeführt, wodurch diese Größen dimensionslos werden. Bei Größen, welche im SI-System eine Dimension besitzen, aber in Hartree-Einheiten dimensionslos sind, wird üblicherweise als Einheit formal a.u. verwendet. So besitzt der Grundzustand des Wasserstoffatoms in Hartree-Einheiten die Energie $E = -0,5$ a.u. oder bezeichnet eine Masse von zwei a.u. das doppelte der Elektronenmasse.

Der Vorteil bei der Verwendung von Hartree-Einheiten ist, dass die Rechnungen der vorliegenden Arbeit somit dimensionslos und materialunabhängig durchgeführt werden können. Die Materialparameter verstecken sich in den Einheiten. So entspricht z. B. eine magnetische Feldstärke von Eins in Hartree-Einheiten entweder einer magnetischen Feldstärke von $2,350\,517 \cdot 10^5$ T bei einer Betrachtung von atomarem Wasserstoff oder einer magnetischen Feldstärke von 603,4 T bei einer Betrachtung von Cu_2O . Analog entspricht eine elektrische Feldstärke von Eins in Hartree-Einheiten entweder $5,142\,206 \cdot 10^{11} \frac{\text{V}}{\text{m}}$ im Falle des Wasserstoffatoms oder $1,760 \cdot 10^8 \frac{\text{V}}{\text{m}}$ für Cu_2O .

Selbiges Phänomen tritt auch bei der Betrachtung der Energieskala auf. So entspricht der Energie des Wasserstoff-Grundzustandes mit $-0,5$ a.u. im Falle von atomarem Wasserstoff eine Energie von $-13,606$ eV, während die entsprechende Energie in Cu_2O mit $-0,092$ eV wesentlich kleiner ist. Weitere Informationen zu den Hartree-Einheiten finden sich in Tabelle B.1.

Tabelle B.1.: Umrechnung von Hartree-Einheiten in SI-Einheiten. Die Werte für atomaren Wasserstoff entstammen Ref. [26]. Die Werte für Cu₂O wurden für die reduzierte Masse $m_e = 0,38 m_{e,\text{vac}}$ und die relative Dielektrizitätszahl $\varepsilon_r = 7,50$ aus Ref. [13] nach den entsprechenden Formeln berechnet ($m_{e,\text{vac}}$ bezeichnet die Masse eines Elektrons im Vakuum). Hierzu muss jeweils ε_0 mit $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$ ersetzt werden. Anmerkung: Da die Werte für die reduzierte Masse und die dielektrische Konstante in Ref. [13] nur relativ ungenau bestimmt sind, macht es für Cu₂O keinen Sinn, die jeweiligen Zahlenwerte genauer anzugeben.

Größe	Hartree-Einheit	Wert für H-Atom	Wert für Cu ₂ O
Energie	$E_h = m_e e^4 / (4\pi \varepsilon_0 \hbar)^2$	$4,359\,744 \cdot 10^{-18} \text{ J}$	$2,945 \cdot 10^{-20} \text{ J}$
Zeit	\hbar / E_h	$2,418\,884 \cdot 10^{-17} \text{ s}$	$3,581 \cdot 10^{-15} \text{ s}$
Länge	$a_0 = 4\pi \varepsilon_0 \hbar^2 / (m_e e^2)$	$0,529\,177 \cdot 10^{-10} \text{ m}$	$1,044 \cdot 10^{-9} \text{ m}$
Masse	m_e	$9,109\,382 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	$3,462 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Ladung	e	$1,602\,176 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	$1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Impuls	\hbar / a_0	$1,992\,852 \cdot 10^{-24} \frac{\text{kg m}}{\text{s}}$	$1,010 \cdot 10^{-25} \frac{\text{kg m}}{\text{s}}$
Drehimpuls	$\hbar = h / (2\pi)$	$1,054\,572 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$	$1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
El. Feldstärke	$E_h / (e a_0)$	$5,142\,206 \cdot 10^{11} \frac{\text{V}}{\text{m}}$	$1,760 \cdot 10^8 \frac{\text{V}}{\text{m}}$
Magn. Flussdichte	$\hbar / (e a_0^2)$	$2,350\,517 \cdot 10^5 \text{ T}$	$6,034 \cdot 10^2 \text{ T}$

Literaturverzeichnis

- [1] T. Kazimierczuk, D. Fröhlich, S. Scheel, H. Stolz und M. Bayer. Giant Rydberg excitons in the copper oxide Cu_2O . *Nature* 514, 343–347 (2014).
- [2] William P. Reinhardt. Complex coordinates in the theory of atomic and molecular structure and dynamics. *Annual Review of Physical Chemistry* 33, 223–255 (1982).
- [3] C. Dembowski, H-D. Gräf, H.L. Harney, A. Heine, W-D. Heiss, H. Rehfeld und A. Richter. Experimental observation of the topological structure of exceptional points. *Physical review letters* 86, 787 (2001).
- [4] W-D. Heiss. Repulsion of resonance states and exceptional points. *Physical Review E* 61, 929 (2000).
- [5] C. Dembowski, B. Dietz, H-D. Gräf, H.L. Harney, A. Heine, W-D. Heiss und A. Richter. Encircling an exceptional point. *Physical Review E* 69, 056216 (2004).
- [6] H. Cartarius. *Exceptional points in atomic spectra and Bose-Einstein condensates*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2008).
- [7] Raam Uzdin und Roland Lefebvre. Finding and pinpointing exceptional points of an open quantum system. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 43, 235004 (2010).
- [8] Nimrod Moiseyev. Quantum theory of resonances: calculating energies, widths and cross-sections by complex scaling. *Physics Reports* 302, 212–293 (1998).
- [9] K. Knopp und F. Bagemihl. *Theory of functions*, Band 1. Courier Corporation (1996).
- [10] T. Kato. *Perturbation theory for linear operators*. Springer-Verlag, Berlin (1966).
- [11] Ulrich Roessler. *Solid state theory. An introduction*. Springer-Verlag, Berlin (2009).
- [12] W. Demtröder. *Experimentalphysik 1. Mechanik und Wärme*. Springer-Verlag, Berlin (2008).
- [13] J.W. Hodby, T.E. Jenkins, C. Schwab, H. Tamura und D. Trivich. Cyclotron resonance of electrons and of holes in cuprous oxide, Cu_2O . *J. Phys. C: Solid State Phys.* 9, 1429 (1976).

- [14] H. Haken und H-C. Wolf. *Molekülphysik und Quantenchemie*. Springer-Verlag, Berlin (2002).
- [15] Richard B. Lehoucq, Danny C. Sorensen und Chao Yang. *ARPACK users' guide: solution of large-scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods*, Band 6. SIAM (1998).
- [16] I.N. Bronstein et al. *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, 7. Auflage (2008).
- [17] I.S. Gradshteyn und I.M. Ryzhik. *Table of integrals, series, and products. Translated from the Russian. Translation edited and with a preface by Alan Jeffrey and Daniel Zwillinger*. Academic Press, Inc., San Diego, CA (2000).
- [18] Holger Cartarius, Jörg Main, Thorsten Losch und Günter Wunner. Resonance wave functions located at the Stark saddle point. *Physical Review A* 81, 063414 (2010).
- [19] Nimrod Moiseyev. *Non-Hermitian quantum mechanics*. Cambridge University Press (2011).
- [20] Marc Aßmann, Johannes Thewes, Dietmar Fröhlich und Manfred Bayer. Quantum Chaos of Rydberg excitons. Bislang unveröffentlicht (Oktober 2015).
- [21] K. Müller und D. Wintgen. Scars in wavefunctions of the diamagnetic Kepler problem. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 27, 2693 (1994).
- [22] Holger Cartarius, Jörg Main und Günter Wunner. Exceptional points in atomic spectra. *Physical review letters* 99, 173003 (2007).
- [23] Jacob Fuchs, Jörg Main, Holger Cartarius und Günter Wunner. Harmonic inversion analysis of exceptional points in resonance spectra. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 47, 125304 (2014).
- [24] A. Messiah. *Quantenmechanik, Band 1*. Walter de Gruyter, Berlin (1976).
- [25] Michael J. Englefield. Group theory and the coulomb problem. (1972).
- [26] Peter J. Mohr und Barry N. Taylor. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2002. *Reviews of modern physics* 77, 1 (2005).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Gelingen der vorliegenden Masterarbeit beigetragen haben. Hierbei gilt mein besonderer Dank

- Herrn Prof. Dr. Jörg Main für die Möglichkeit, die vorliegende Masterarbeit am 1. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart durchzuführen. Er hat mich durch lehrreiche Diskussionen und hilfreiche Tipps ausgesprochen gut betreut und hatte immer ein offenes Ohr für Fragen.
- Frau Prof. Dr. Maria Daghofer, die den Mitbericht zu dieser Arbeit übernommen hat.
- Herrn Prof. Dr. Günter Wunner für das Interesse an der Arbeit sowie die Möglichkeit, meine Forschungstätigkeit am 1. Institut für Theoretische Physik im Rahmen einer Dissertation fortführen zu können.
- Herrn Priv. Doz. Dr. Holger Cartarius, der sich immer Zeit genommen hat, um über ein Thema zu diskutieren oder eine Frage zu beantworten.
- meiner Freundin Teresa Schaller, die immer für mich da war, wenn ich sie gebraucht habe und die ich sehr liebe. Vielen Dank für die vielen leckeren Vesperbrote, die du mir gemacht hast.
- meiner Familie, die mich auf meinem Ausbildungsweg seit Jahren sehr unterstützt hat. Ohne euch wäre das alles nie möglich gewesen.
- Tobias Rau, der mir bei programmiertechnischen Fragen stets eine große Hilfe ist.
- Frank Schweiner und Daniel Krüger für die gute Büroatmosphäre und die gute Zusammenarbeit bei den kleinen Fragen im Alltag eines Physikers.
- allen Mitarbeitern des 1. Instituts für Theoretische Physik für das tolle Arbeitsklima und insbesondere den Systemadministratoren, die einen reibungslosen Arbeitsalltag am Rechner erst ermöglicht haben.

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre,

- dass ich diese Masterarbeit selbständig verfasst habe,
- dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet habe,
- dass die eingereichte Arbeit weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen ist,
- dass ich die Arbeit weder vollständig noch in Teilen bereits veröffentlicht habe, es sei denn, der Prüfungsausschuss hat die Veröffentlichung vorher genehmigt
- und dass das elektronische Exemplar mit den anderen Exemplaren übereinstimmt.

Stuttgart, den 09. Oktober 2015

Matthias Feldmaier