Suche nach exzeptionellen Punkten bei Exzitonen in Kupferoxydul in äußeren Feldern unter Berücksichtigung der Bandstruktur

Bachelorarbeit von
Patrick Egenlauf

21. Oktober 2020

Prüfer: Prof. Dr. Jörg Main

Institut für Theoretische Physik I
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **5**
1.1 Einführung 5
1.2 Aufbau der Arbeit 6

2 Theoretische Grundlagen und Methoden **7**
2.1 Exzitonen 7
2.2 Kupferoxydul Cu_2O in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern . 8
2.2.1 Hamiltonoperator 8
2.2.2 Numerische Diagonalisierung des Hamiltonian 10
2.3 Resonanzen und komplexe Rotation 12
2.3.1 Resonanzen 12
2.3.2 Komplexe Eigenwerte 13
2.3.3 Komplexe Koordinatenrotation 14
2.4 Exzeptionelle Punkte 16
2.4.1 Ein einfaches Beispiel 17
2.4.2 Dreipunktmethode 19

3 Ergebnisse und Auswertung **23**
3.1 Exzeptionelle Punkte im wasserstoffartigen Modell 23
3.1.1 Vertauschung bei Umkreisung 27
3.2 Berücksichtigung der Bandstruktur 27
3.3 Bestimmung der Position eines exzeptionellen Punktes 29
3.4 Schrittweise Einschalten der Bandstruktur 30
3.5 Vollständig eingeschaltete Bandstruktur 34

4 Zusammenfassung und Ausblick **37**

Literatur **39**

Danksagung **41**

1 Einleitung

Exzeptionelle Punkte sind bei Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern zu finden. Sie eignen sich hervorragend für theoretische Untersuchungen, aber auch zur experimentellen Verifizierung. Dabei werden in dieser Arbeit nur die theoretischen Aspekte betrachtet. Dafür wird zunächst eine Einführung in das Thema gegeben sowie der Aufbau der Arbeit kurz erläutert.

1.1 Einführung

In der Quantenmechanik werden in der Schrödingergleichung üblicherweise hermitesche Operatoren verwendet, um beim Lösen reelle Messgrößen zu erhalten. Die so berechneten Eigenzustände sind immer orthogonal zueinander, auch bei entarteten Eigenwerten.
Für nicht-hermitesche Operatoren können sowohl die Eigenwerte als auch die Eigenzustände entarten. Dies wird als exzeptioneller Punkt bezeichnet. Dieser Effekt kann beispielsweise in offenen Quantensystemen beobachtet werden, bei denen Resonanzen als komplexe Eigenwerte nicht-hermitescher Hamiltonoperatoren beschrieben werden.
Ein physikalisches Beispiel ist das Wasserstoffatom in äußeren elektrischen und magnetischen Feldern. Die exzeptionellen Punkte treten bei bestimmten Kombinationen der beiden Feldstärken auf. Die theoretisch berechneten Werte [1] liegen jedoch bei sehr hohen Feldstärken, welche experimentell nicht erreicht werden können.
Eine Alternative zum Wasserstoffatom sind Exzitonen in Kupferoxydul. Diese werden von Prof. Dr. Bayer et al. an der TU Dortmund untersucht. Erste theoretische Untersuchungen zu Exzitonen in Kupferoxydul in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern wurden von Matthias Feldmaier [2] durchgeführt, welche exzeptionelle Punkte bei experimentell zugänglichen Feldstärken lieferten. Diese wurden jedoch im wasserstoffartigen Modell für Kupferoxydul berechnet, bei welchem die Bandstruktur nicht berücksichtigt wird.
Das Ziel dieser Arbeit ist deshalb, exzeptionelle Punkte unter Berücksichtigung der Bandstruktur zu finden. Dabei stellen sich die Fragen, ob exzeptionelle Punkte auch bei Berücksichtigung der Bandstruktur existieren und wie stark sich die Feldstärken und Resonanzpositionen ändern.

1.2 Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 werden zunächst die theoretischen Grundlagen sowie die verwendeten Methoden behandelt. Dabei wird zuerst das Exziton genauer erklärt. Im zweiten Teil der Grundlagen wird der Festkörper Kupferoxydul und der Hamiltonoperator der Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern eingeführt. Zudem wird die Methode zur Berechnung der Eigenwerte erläutert. Anschließend werden Resonanzen vorgestellt, welche die komplexe Koordinatenrotation motivieren. Im letzten Teil dieses Kapitels werden exzeptionelle Punkte genauer betrachtet und anhand eines Beispiels erklärt. Die Dreipunktmethode dient der Lokalisierung der exzeptionellen Punkte.
Im dritten Kapitel werden zuerst die Ergebnisse aus der Masterarbeit von Matthias Feldmaier [2] zum Teil reproduziert. Dies dient vor allem dazu, passende Parameter zu finden, um einerseits die Konvergenz zu steigern und andererseits die Rechenzeit zu minimieren. Anschließend wird der Einfluss der Bandstruktur auf die Lage des exzeptionellen Punktes untersucht. Dabei wird zunächst der Suchvorgang zur Bestimmung der Position des exzeptionellen Punktes erläutert. Die Bandstruktur wird schrittweise eingeschaltet und die Position des Punktes verfolgt. Als letztes wird der gefundene Punkt bei vollständig eingeschalteter Bandstruktur genauer betrachtet und eine Vermutung über dessen tatsächliche Position in der Feldebene gemacht.

2 Theoretische Grundlagen und Methoden

2.1 Exzitonen

Dieser Abschnitt orientiert sich an Ref. [3]. Befindet sich ein Halbleiter im Grundzustand, so ist das Valenzband vollständig besetzt. Im Leitungsband hingegen befinden sich im Grundzustand keine Elektronen. Durch Energiezufuhr können Elektronen vom Valenz- ins Leitungsband angeregt werden. Dadurch wird ein positives Loch im Valenzband hinterlassen, welches, aufgrund der Coulomb-Interaktion, mit dem angeregten Elektron wechselwirkt. Dieses Quasi-Teilchen, bestehend aus Elektron und Loch, wird als Exziton bezeichnet und kann in einem einfachen wasserstoffartigen Modell durch die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = E_\mathrm{g} + \frac{\boldsymbol{p}_\mathrm{e}^2}{2m_\mathrm{e}} + \frac{\boldsymbol{p}_\mathrm{h}^2}{2m_\mathrm{h}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon\,|\boldsymbol{r}_\mathrm{e} - \boldsymbol{r}_\mathrm{h}|} \tag{2.1}$$

beschrieben werden [3]. E_g steht für die Energie der Bandlücke (engl. *energy gap*). Diese bewirkt lediglich eine Verschiebung in der Energieebene und wird im weiteren Verlauf der Arbeit nicht berücksichtigt. Der Index e (engl. *electron*) steht für das Elektron und h (engl. *hole*) steht für das Loch. Der zweite und dritte Term beschreiben die jeweiligen kinetischen Energien des Elektrons und des Lochs. Der vierte Term stellt die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektron und Loch dar. Die Abschirmung durch den Kristall wird dabei durch die Dielektrizitätskonstante ε berücksichtigt.
Durch die Einführung von Relativ- und Schwerpunktkoordinaten, sowie von Gesamtmasse $M = m_\mathrm{e} + m_\mathrm{h}$ und reduzierter Masse $\mu = m_\mathrm{e}m_\mathrm{h}/M$ kann die Ähnlichkeit der Hamiltonfunktion zum Hamiltonian des Wasserstoffs verdeutlicht werden. Der Bohrradius sowie die Rydbergenergie des Exzitons sind analog zum Wasserstoff durch

$$a_\mathrm{exc} = a_0\frac{m_0\varepsilon}{\mu} \quad \text{und} \quad E_\mathrm{R,exc} = E_\mathrm{R,H}\frac{\mu}{m_0\varepsilon} \tag{2.2}$$

definiert. Dabei ist zu beachten, dass die reduzierte Masse μ nicht wie beim Wasserstoff zu $\mu_\mathrm{H} \approx m_\mathrm{e}$ vereinfacht werden kann. Sie muss explizit berechnet werden. Die beiden

Größen aus Gleichung (2.2) bewegen sich üblicherweise in der Größenordnung [4]

$$1\,\mathrm{nm} \leq a_{\mathrm{exc}} \lessapprox 50\,\mathrm{nm} \qquad \text{und} \tag{2.3a}$$

$$1\,\mathrm{meV} \leq E_{\mathrm{R,exc}} \leq 200\,\mathrm{meV}\ . \tag{2.3b}$$

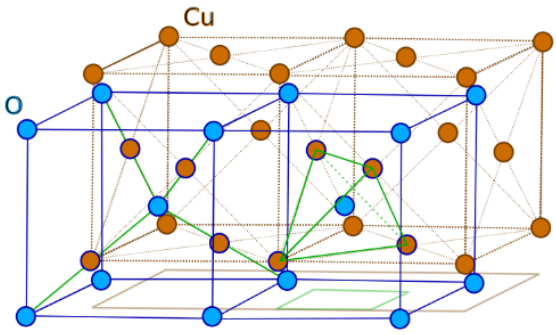
2.2 Kupferoxydul Cu_2O in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern

Der nachfolgende Abschnitt und seine Unterabschnitte orientieren sich an Ref. [5]. Da die Rydbergenergie für Exzitonen in Kupferoxydul im Vergleich zu anderen Halbleitern groß ist, eignet es sich gut um Exzitonen zu untersuchen. Deshalb wird hier eine kurze Einführung in den Festkörper gegeben. Der Halbleiter Kupferoxydul ist ein roter Festkörper, welcher eine kubische Gitterstruktur aufweist. Dabei sind die Kupferionen in einer kubisch flächenzentrierten Struktur (*fcc*) und die Oxidionen in einer kubisch raumzentrierten Struktur (*bcc*) angeordnet, wie in Abbildung 2.1a zu sehen. Eine Einheitszelle setzt sich demnach aus vier Kupferionen und zwei Oxidionen zusammen.
Die komplexe Bandstruktur ist in Abbildung 2.1b dargestellt. Die verschiedenen Farben stehen für die Wellenlänge des Lichts, mit welchem die Exzitonen in die verschiedenen Zustände angeregt werden. In dieser Arbeit werden nur die gelben Exzitonen untersucht.

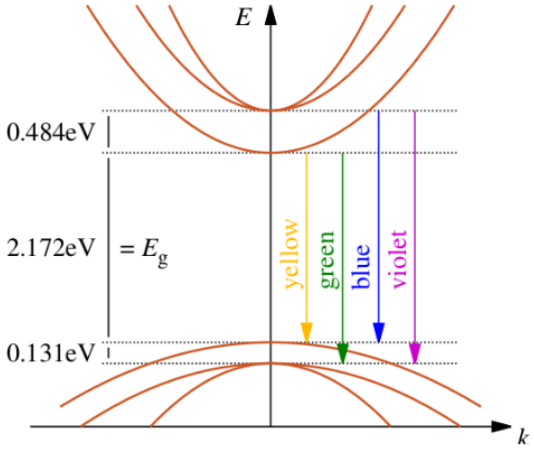
2.2.1 Hamiltonoperator

Aufgrund der komplexen Bandstruktur von Kupferoxydul weicht der Hamiltonian der Exzitonen von dem aus Gleichung (2.1) ab. Dies ist in der Entartung des Valenzbandes sowie dessen Nichtparabolizität begründet. Wie in Abbildung 2.1b zu sehen, ist das Band bei $k = 0$ symmetrisch. An diesem sogenannten Γ-Punkt ist das Band dreifach entartet, was durch einen Quasispin $I = 1$ beschrieben wird. Durch die Spin-Bahn-Kopplung zwischen dem Lochspin $\boldsymbol{S}_{\mathrm{h}}$ und dem Quasispin teilt sich das Valenzband in zwei Bänder auf, wobei der effektive Lochspin $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{S}_{\mathrm{h}}$ des oberen Valenzbandes $\boldsymbol{J} = 1/2$ und der des unteren Valenzbandes $\boldsymbol{J} = 3/2$ ist. Das höher liegende Band ist zweifach entartet, wohingegen das tiefer liegende Band vierfach entartet ist. Das Wechselwirken der Bänder miteinander sowie die nicht vorhandene Kugelsymmetrie des Kristalls führen zu einer Abweichung der Bänder von der Parabelform [6].
Der Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\mathrm{e}}\left(\boldsymbol{p}_{\mathrm{e}}\right) = \frac{\boldsymbol{p}_{\mathrm{e}}^2}{2m_{\mathrm{e}}} \tag{2.4}$$



(a)



(b)

Abbildung 2.1: (a) Kristallgitter von Kupferoxydul, wobei die Kupferionen eine *fcc* Struktur und die Sauerstoffionen eine *bcc* Struktur annehmen. Die Einheitszelle besteht aus sechs Ionen, wovon vier Kupfer- und zwei Sauerstoffionen sind. (b) Bandstruktur von Kupferoxydul um das Zentrum der ersten Brillouin-Zone vereinfacht dargestellt. Die vier verschiedenen Exzitonserien sind durch die jeweilige Farbe des Lichts, durch welche sie angeregt werden, verdeutlicht. Bearbeitet aus Ref. [5].

beschreibt die kinetische Energie des Elektrons. Die Entartungen sowie das Abweichen der Bänder von der Parabelform führen zu dem komplizierten Hamiltonian [6, 7]

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_\mathrm{h}\left(\boldsymbol{p}_\mathrm{h}\right) &= \mathcal{H}_\mathrm{so} + \left(1/2\hbar^2 m_0\right)\left\{\hbar^2\left(\gamma_1 + 4\gamma_2\right)\boldsymbol{p}_\mathrm{h}^2\right. \\
&+ 2\left(\eta_1 + 2\eta_2\right)\boldsymbol{p}_\mathrm{h}^2\left(\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{S}_\mathrm{h}\right) \\
&- 6\gamma_2\left(p_{\mathrm{h}1}^2\boldsymbol{I}_1^2 + \mathrm{c.p.}\right) - 12\eta_2\left(p_{\mathrm{h}1}^2\boldsymbol{I}_1\boldsymbol{S}_{\mathrm{h}1} + \mathrm{c.p.}\right) \\
&- 12\gamma_3\left(\left\{p_{\mathrm{h}1},p_{\mathrm{h}2}\right\}\left\{\boldsymbol{I}_1,\boldsymbol{I}_2\right\} + \mathrm{c.p.}\right) \\
&- \left.12\eta_3\left(\left\{p_{\mathrm{h}1},p_{\mathrm{h}2}\right\}\left(\boldsymbol{I}_1\boldsymbol{S}_{\mathrm{h}2} + \boldsymbol{I}_2\boldsymbol{S}_{\mathrm{h}1}\right) + \mathrm{c.p.}\right)\right\} \qquad (2.5)
\end{aligned}$$

des Lochs. Dabei ist $\boldsymbol{p} = (p_1,p_2,p_3)$, $\{a,b\} = \frac{1}{2}(ab + ba)$ der Antikommutator, c.p. die zyklische Permutation und γ_i mit $i = 1,2,3$ sind die ersten drei Luttinger-Parameter. Der Term für die Spin-Bahn-Kopplung lautet [6, 7]

$$\mathcal{H}_\mathrm{so} = \frac{2}{3}\Delta\left(1 + \frac{1}{\hbar^2}\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{S}_\mathrm{h}\right) . \qquad (2.6)$$

Die Energielücke zwischen dem zweifach entarteten, oberen und dem vierfach entarteten, unteren Valenzband wird durch Δ ausgedrückt.
Aufgrund des Magnetfelds wird die minimale Kopplung durch $\boldsymbol{p}_\mathrm{e} \to \boldsymbol{p}_\mathbf{e} + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_\mathrm{e})$ und $\boldsymbol{p}_\mathrm{h} \to \boldsymbol{p}_\mathrm{h} - e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_\mathrm{h})$ eingeführt, wobei $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_\mathrm{e,h}) = (\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}_\mathrm{e,h})/2$ das Vektorpotential für ein homogenes Magnetfeld ist. Die Wechselwirkung zwischen Magnetfeld und den Spins wird durch den Hamiltonian [7]

$$\mathcal{H}_B = \mu_\mathrm{B}\left[g_c\boldsymbol{S}_\mathrm{e} + (3\kappa + g_s/2)\,\boldsymbol{I} - g_s\boldsymbol{S}_\mathrm{h}\right]\cdot\boldsymbol{B}/\hbar \tag{2.7}$$

berücksichtigt. Dabei ist μ_B das Kernmagneton, g_c der Landé-Faktor des Elektrons, g_s der Landé-Faktor des Lochs und κ der vierte Luttinger-Parameter. Der Hamiltonian für ein elektrisches Feld welches auf ein Exziton wirkt, lautet

$$\mathcal{H}_\mathrm{F}\left(\boldsymbol{r}_\mathrm{e} - \boldsymbol{r}_\mathrm{h}\right) = -e\left(\boldsymbol{r}_\mathrm{e} - \boldsymbol{r}_\mathrm{h}\right)\cdot\boldsymbol{F}\ , \tag{2.8}$$

wobei $\boldsymbol{F}$ die elektrische Feldstärke ist. Zur späteren Berechnung werden die Relativ- sowie Schwerpunktkoordinaten durch [8, 9]

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{r} &= \boldsymbol{r}_\mathrm{e} - \boldsymbol{r}_\mathrm{h},\\
\boldsymbol{R} &= \frac{m_\mathrm{e}}{m_\mathrm{e}+m_\mathrm{h}}\boldsymbol{r}_\mathrm{e} + \frac{m_\mathrm{h}}{m_\mathrm{e}+m_\mathrm{h}}\boldsymbol{r}_\mathrm{h},\\
\boldsymbol{p} &= \hbar\boldsymbol{k} - \frac{e}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{R} = \frac{m_\mathrm{h}}{m_\mathrm{e}+m_\mathrm{h}}\boldsymbol{p}_\mathrm{e} - \frac{m_\mathrm{e}}{m_\mathrm{e}+m_\mathrm{h}}\boldsymbol{p}_\mathrm{h},\\
\boldsymbol{P} &= \hbar\boldsymbol{K} + \frac{e}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r} = \boldsymbol{p}_\mathrm{e} + \boldsymbol{p}_\mathrm{h}
\end{aligned} \tag{2.9}$$

eingeführt, wobei $\boldsymbol{r}$ die Relativ-, $\boldsymbol{R}$ die Schwerpunktkoordinate, $\boldsymbol{p}$ der Relativ- und $\boldsymbol{P}$ der Schwerpunktimpuls ist. $\boldsymbol{B}$ ist das Magnetfeld und $\boldsymbol{K}$ ein Scheinimpuls, welcher jedoch vernachlässigt werden kann, da das Photon nur einen sehr geringen Impuls besitzt. Die materialspezifischen Konstanten für Kupferoxydul welche in den Gleichungen (2.1)-(2.9) vorkommen, sind in Tabelle 2.1 dargestellt.
Durch Addition der verschiedenen Hamiltonian und Durchführung der oben eingeführten Koordinatentransformation ergibt sich der gesamte Hamiltonian für Exzitonen in elektrischen und magnetischen Feldern. Dieser kann in Ref. [5] nachgelesen werden.

2.2.2 Numerische Diagonalisierung des Hamiltonian

Um die Eigenwerte und Eigenzustände numerisch zu berechnen, wird die stationäre Schrödingergleichung in einer vollständigen Basis formuliert. Die Kugelflächenfunktionen mit den Quantenzahlen L und M werden für den Bahndrehimpuls benutzt. Wie oben bereits erwähnt, werden zusätzlich der Quasispin $\boldsymbol{I}$, der Lochspin $\boldsymbol{S}_\mathrm{h}$ und der Elektronenspin $\boldsymbol{S}_\mathrm{e}$

Tabelle 2.1: Materialspezifische Konstanten von Cu_2O welche in dieser Arbeit verwendet wurden.

Bandlückenenergie	$E_\mathrm{g} = 2{,}172\,08\,\mathrm{eV}$	[10]
Masse eines Elektrons	$m_\mathrm{e} = 0{,}99\,m_0$	[11]
Masse eines Lochs	$m_\mathrm{h} = 0{,}58\,m_0$	[11]
Dielektrizitätskonstante	$\varepsilon = 7{,}5$	[12]
Spin-Bahn-Kopplung	$\Delta = 0{,}131\,\mathrm{eV}$	[13]
Valenzband-Parameter	$\gamma_1 = 1{,}76$	[13]
	$\gamma_2 = 0{,}7532$	[13]
	$\gamma_3 = -0{,}3668$	[13]
	$\eta_1 = -0{,}020$	[13]
	$\eta_2 = -0{,}0037$	[13]
	$\eta_3 = -0{,}0337$	[13]
Vierter Luttinger-Parameter	$\kappa = -0{,}5$	[7]
Landé-Faktor des Elektrons	$g_\mathrm{c} = 2{,}1$	[14]

eingeführt. Um die Basis zu erhalten, müssen die verschiedenen Kopplungen zwischen den Quantenzahlen berücksichtigt werden. Der Quasispin koppelt mit dem Lochspin zum effektiven Lochspin $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{S}_\mathrm{h}$. Wird der Drehimpuls $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{J} + \boldsymbol{L}$ mit dem Elektronenspin $\boldsymbol{S}_\mathrm{e}$ gekoppelt, ergibt sich der Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{F}_\mathrm{t} = \boldsymbol{F} + \boldsymbol{S}_\mathrm{e}$ sowie dessen z-Komponente M_{F_t}. Zur Berechnung des Radialteils werden die Coulomb-Sturm-Funktionen [6, 15, 16]

$$U_{N,L} = N_{N,L} \left(\frac{2r}{\alpha}\right)^L \mathrm{e}^{-\frac{r}{\alpha}} L_N^{2L+1}\left(\frac{2r}{\alpha}\right) \tag{2.10}$$

verwendet. $N_{N,L}$ ist ein Normalisierungsfaktor, wobei der Index $N = n - L - 1$ nicht für die Haupt- (n) sondern für die radiale Quantenzahl steht. $L_n^m(x)$ sind die Laguerre-Polynome. Die Konvergenz der Matrixdiagonalisierung wird durch den Parameter α beeinflusst, welcher frei gewählt werden kann. Die Basiszustände ergeben sich demnach zu

$$|\Pi\rangle = |N, L;\, (I, S_\mathrm{h})\,, J;\, F, S_\mathrm{e}; F_t, M_{F_t}\rangle\ , \tag{2.11}$$

wobei $\Pi = \{N, L;\, (I, S_\mathrm{h})\,, J;\, F, S_\mathrm{e}; F_t, M_{F_t}\}$ eine Abkürzung für die verwendeten Quantenzahlen ist.
Der Hamiltonian wird nach Ref. [7] in sphärischer Tensornotation dargestellt. Die Symmetrieachse, entlang welcher das magnetische und das elektrische Feld ausgerichtet werden, ist [001]. Die Koordinaten des Hamiltonians werden so gedreht, dass die Orientierung der Felder und die Quantisierungsachse identisch sind. Zur Berechnung wird für die

Exzitonwellenfunktion $|\Psi\rangle$ der Ansatz

$$|\Psi\rangle = \sum_{\Pi} c_{\Pi} |\Pi\rangle \tag{2.12}$$

verwendet. Dadurch wird die Schrödingergleichung zu einem generalisierten Eigenwertproblem

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{c} = E\boldsymbol{M}\boldsymbol{c}\,. \tag{2.13}$$

Dabei ist $\boldsymbol{H}$ die Hamiltonmatrix und $\boldsymbol{M}$ die Überlappungsmatrix. Um eine endliche Basis zu erhalten, werden die Quantenzahlen N und F auf einen ausreichend hohen Wert begrenzt. Mit Hilfe einer passenden ARPACK-Routine [17] können die Eigenwerte E und die Eigenvektoren $\boldsymbol{c}$ berechnet werden.

2.3 Resonanzen und komplexe Rotation

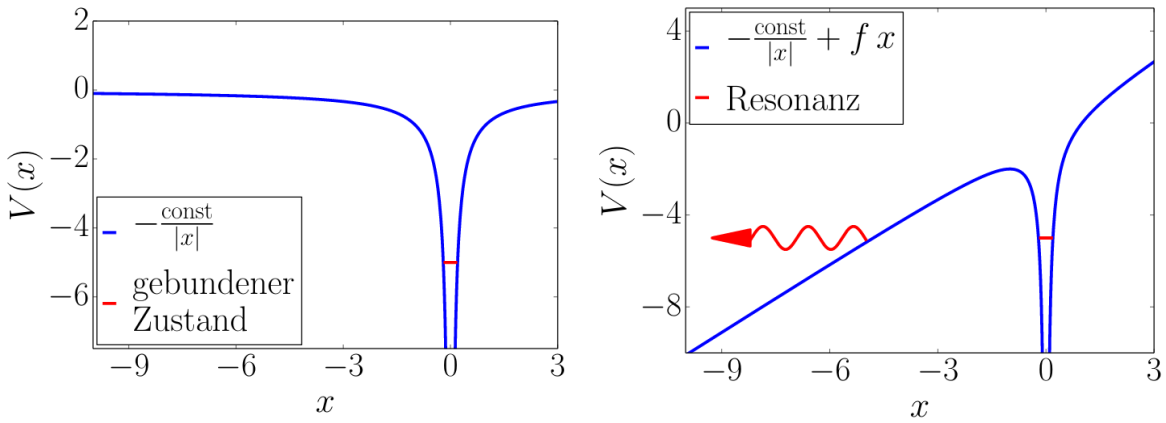
Dieser Abschnitt und seine Unterabschnitte orientiert sich an Ref. [2] und [5].

2.3.1 Resonanzen

Als Resonanz wird ein temporärer quasigebundener Zustand eines Quantensystems bezeichnet. Ein radioaktiver Atomkern befindet sich beispielsweise in solch einem Zustand. Der Kern zerfällt in ein Strahlungsteilchen und in einen neuen Atomkern. Allgemein ist eine Resonanz also ein langlebiger Zustand, welcher ausreichend Energie besitzt, um in zwei oder mehrere Untersysteme zu zerfallen [18]. Wie in Abbildung 2.2 zu sehen ist, kann eine Resonanz bei Exzitonen durch das Anlegen eines elektrischen Feldes entstehen. Der gebundene Zustand in Abbildung 2.2a wird zur Resonanz in Abbildung 2.2b. Das Coulomb-Potential wird zum Coulomb-Stark-Potential mit der allgemeinen Form

$$V_{\mathrm{CS}}(\boldsymbol{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon\,|\boldsymbol{r}|} + \boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{r}\,, \tag{2.14}$$

wobei $\boldsymbol{f} = \boldsymbol{F}/F_0$ die Stärke des elektrischen Feldes $\boldsymbol{F}$ ist. Das angelegte elektrische Feld setzt die Potentialbarriere herab, weshalb ein Elektron durch diese mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit tunneln kann und in einen Streuzustand übergeht. Demnach wird der stabile, gebundene Zustand metastabil, also zu einer Resonanz, mit einer begrenzten Lebensdauer.



(a) Coulomb-Potential **(b)** Coulomb-Stark-Potential

Abbildung 2.2: (a) Coulomb-Potential (blau) mit einem gebundenen Zustand (rot). Dieser Zustand besitzt eine bestimmte Energie und kann nicht zerfallen. (b) Wird zu dem Coulomb-Potential ein zweiter Potentialterm $f \cdot x$ addiert, wobei $f = F/F_0$ die Stärke eines elektrischen Feldes F ist, so ergibt sich das eingezeichnete Coulomb-Stark-Potential (blau). Der eingezeichnete Zustand (rot), ist derselbe wie im Coulomb-Potential, dieser ist jedoch nicht mehr gebunden. Ein Elektron, welches sich in diesem Zustand befindet, kann durch die zu sehende Potentialbarriere mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit tunneln. Dieser metastabile Zustand, welcher durch das elektrische Feld hervorgerufen wird, heißt Resonanz. Aus Ref. [2].

2.3.2 Komplexe Eigenwerte

Resonanzen können ebenso wie gebundene Zustände mit der Zeitentwicklung für stationäre Zustände [19]

$$\Psi_{\mathrm{R}}(t) = e^{-\mathrm{i}\frac{E_{\mathrm{R}}t}{\hbar}}\Psi_{\mathrm{R}}(0) \tag{2.15}$$

beschrieben werden. Um die endliche Lebensdauer der Resonanz auszudrücken, ist die Energie

$$E_{\mathrm{R}} = E_{\mathrm{res}} - \mathrm{i}\frac{\Gamma}{2} \tag{2.16}$$

komplex. Dabei sind E_{res} und $\Gamma \geq 0$ reell. Wird Gleichung (2.16) in Gleichung (2.15) eingesetzt, bewirkt der Teilterm $-\mathrm{i}\Gamma/2$ einen exponentiellen Zerfall des Zustandes. Da hermitesche Operatoren nur reelle Eigenwerte liefern, muss der Hamiltonian nicht-hermitesch sein, um die komplexen Eigenwerte einer Resonanz zu erhalten.

2.3.3 Komplexe Koordinatenrotation

Wie bereits erwähnt, muss der Hamiltonian nicht-hermitesch sein, um Resonanzen mit deren komplexen Eigenwerten zu berechnen. Dafür wird im Allgemeinen eine komplexe Koordinatenrotation durchgeführt, welche hier, wie in Ref. [19], am Hamiltonian des Wasserstoffatoms für die s-Zustände

$$\mathcal{H}(r) = -\frac{1}{2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{1}{r} \tag{2.17}$$

veranschaulicht werden soll. Dabei ist r die radiale Koordinate in Kugelkoordinaten. Daraus folgt für den Erwartungswert der Energie

$$\langle E\rangle = \int_0^\infty R(r)\left[-\frac{1}{2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{1}{r}\right]R(r)\,r^2\mathrm{d}r \Big/ \int_0^\infty R^2(r)\,\mathrm{d}r\,, \tag{2.18}$$

wobei die s-Wellenfunktion $\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)/\sqrt{4\pi}$ mit $R(r)$ als reelle Funktion angenommen wurde. Es wird über die reelle Achse integriert. Mit Hilfe des Cauchy'schen Integralsatzes kann Gleichung (2.18) in ein Linienintegral

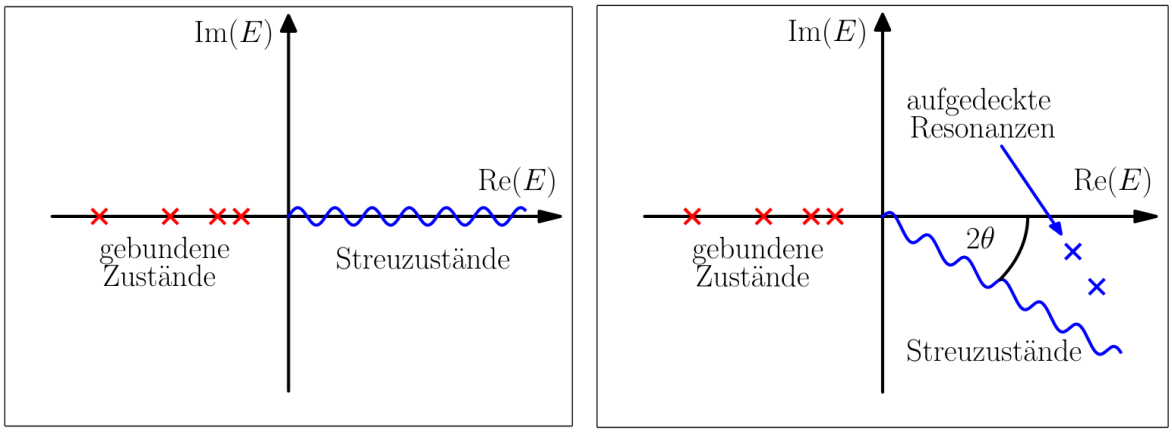
$$\langle E\rangle = \int_C R(z)\left[-\frac{1}{2}\frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}z^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} - \frac{1}{z}\right]R(z)\,z^2\mathrm{d}z \Big/ \int_C R^2(z)\,\mathrm{d}z \tag{2.19}$$

überführt werden. Dabei ist zu beachten, dass $R(r)$ analytisch sein muss. Wird $R(z) = 2e^{-z}$ mit $z = re^{\mathrm{i}\theta}$ gewählt, entspricht dies einer Drehung des reellen Integrationsweges in die komplexe Ebene um den Winkel θ. Durch Einsetzen in Gleichung (2.19) ergibt sich

$$\langle E\rangle = \frac{\int_0^\infty e^{-r\exp(\mathrm{i}\theta)}\left[-\frac{e^{-\mathrm{i}2\theta}}{2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{e^{-\mathrm{i}\theta}}{r}\right]e^{-r\exp(\mathrm{i}\theta)}\left(e^{\mathrm{i}\theta}r\right)^2 e^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{d}r}{\int_0^\infty \left(e^{-r\exp(\mathrm{i}\theta)}\right)^2\left(e^{\mathrm{i}\theta}r\right)^2 e^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{d}r} = -\frac{1}{2}\,. \tag{2.20}$$

Diese Lösung ist identisch zu der von Gleichung (2.18). Aufgrund der verschwindenden Wellenfunktion gebundener Zustände für $r \to \infty$ muss der Integrationspfad im Unendlichen nicht auf die reelle Achse treffen, da dies keinen Einfluss auf den Wert des Linienintegrals hat.
Nach Ref. [18] müssen die folgenden Bedingungen beachtet werden, um zu gewährleisten, dass eine komplexe Koordinatenrotation keine Veränderung der gebundenen Energieeigenwerte nach sich zieht:

- Die Ortsvariable r ist selbst keine Observable.
- Die komplexe Rotation muss auch auf die Operatoren angewandt werden.
- Es wird nur die Funktion $R(r)$ komplex konjugiert, falls diese komplex ist, nicht jedoch der sogenannte Skalierungsfaktor $e^{\mathrm{i}\theta}$.



(a) Ungedrehter Hamiltonian **(b)** Gedrehter Hamiltonian

Abbildung 2.3: (a) Ohne komplexe Rotation sind keine Resonanzen sichtbar. Die gebundenen sowie die Streuzustände befinden sich auf der reellen Achse. (b) Nach der Rotation sind die gebundenen Zustände nach wie vor unverändert, jedoch sind die Streuzustände in die komplexe Ebene gedreht. Die Rotation deckt Resonanzen auf, welche nicht vom Winkel θ abhängen. Aus Ref. [2].

Die komplexe Koordinatenrotation beeinflusst zwar nicht die gebundenen Zustände, jedoch die Streuzustände. Dies wird nach Ref. [1] über die Lösung eines radialen Streuproblems

$$\Psi_{\text{scatt}} = A\left(k\right)\frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r} + B\left(k\right)\frac{e^{-\mathrm{i}kr}}{r} \tag{2.21}$$

veranschaulicht. Dabei gilt für die Energie ($m = \hbar = 1$) für $r \to \infty$

$$E = \frac{k^2}{2}\,. \tag{2.22}$$

Bei einer Rotation $r \to re^{\mathrm{i}\theta}$ der Wellenfunktion aus Gleichung (2.21) in die komplexe Ebene, liefert diese unphysikalische Ergebnisse, da sie divergiert. Um dies zu vermeiden, wird die Rotation ebenso auf den Wellenvektor $k \to ke^{-\mathrm{i}\theta}$ angewandt, wodurch sich die Energieeigenwerte zu

$$E = \frac{k^2 e^{-\mathrm{i}2\theta}}{2} \tag{2.23}$$

verändern. Die Rotation bewirkt eine Drehung in die komplexe Ebene um den Winkel -2θ (vgl. Abbildung 2.3). Dadurch werden, wie in Abbildung 2.3b zu sehen, Resonanzen aufgedeckt, deren Energien unabhängig vom Winkel θ sind. Der inverse harmonische Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{1}{2}x^2\,, \tag{2.24}$$

dient wie in Ref. [18] als Beispiel zur Berechnung von Resonanzen. Nur ungebundene Zustände sind Lösungen der zugehörigen Schrödingergleichung, weshalb es keine quadratintegrablen Wellenfunktionen gibt. Durch Anwendung der komplexen Rotation ergibt sich der komplex rotierte Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_\mathrm{r} = -\frac{1}{2}e^{-\mathrm{i}2\theta}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - e^{\mathrm{i}2\theta}\frac{1}{2}x^2 \tag{2.25}$$

mit den komplex rotierten und bei richtig gewähltem Winkel θ auch quadratintegrablen Wellenfunktionen

$$\Psi_n\left(xe^{\mathrm{i}\theta}\right) = cH_n\left(\frac{x}{\sqrt{\mathrm{i}}}e^{\mathrm{i}\theta}\right)\exp\left(\mathrm{i}e^{\mathrm{i}2\theta}\frac{x^2}{2}\right) \tag{2.26}$$

als dessen Lösungen. $H_n(x)$ sind die Hermite-Polynome und c eine Normierungskonstante. Die Energieeigenwerte

$$E_n = -\mathrm{i}\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{2.27}$$

sind rein imaginär. Es gibt demnach unendlich viele Resonanzen, wobei diese unterschiedliche Lebensdauern $\Gamma = 2n + 1$ besitzen. Zusammengefasst hat die komplexe Koordinatenrotation folgende Auswirkungen:

- Wie in Abbildung 2.3 zu sehen, hat die komplexe Rotation keinen Einfluss auf gebundene Zustände.
- Die Streuzustände werden durch die komplexe Rotation um den Winkel -2θ in die komplexe Ebene gekippt. Dies ist in Abbildung 2.3b dargestellt.
- Wird der Winkel θ der komplexen Rotation groß genug gewählt, so werden zuvor verdeckte Resonanzen (Abb. 2.3a) aufgedeckt, wobei deren Energien unabhängig von θ sind (Abb. 2.3b).

In dem verwendeten Programm wird der komplexe Drehwinkel θ durch den Konvergenzparameter α berücksichtigt, welcher auch in Gleichung (2.10) auftaucht. Dieser Parameter

$$\alpha = |\alpha|\, e^{\mathrm{i}\theta} \tag{2.28}$$

setzt sich aus dem Betrag $|\alpha|$, welcher ausschließlich die Konvergenz beeinflusst, und dem komplexen Drehwinkel θ zusammen.

2.4 Exzeptionelle Punkte

Der nachfolgende Abschnitt und seine Unterabschnitte orientieren sich an Ref. [2]. In parameterabhängigen Eigenwertgleichungen können Verzweigungspunkte auftreten. Diese

werden als exzeptionelle Punkte (EP) bezeichnet. In Ref. [1] wird beispielhaft die lineare Abbildung

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{T}(\kappa)\,\boldsymbol{b} \tag{2.29}$$

betrachtet, wobei $\boldsymbol{a}$,$\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ sind und $\boldsymbol{T}(\kappa)$ eine lineare Abbildung ist. In einem Gebiet G, welches Teil der komplexen Ebene ist, hängt diese Abbildung holomorph von dem Parameter $\kappa \in \mathbb{C}$ ab. Die Eigenwerte λ der Gleichung (2.29) können über die algebraische Gleichung

$$\det\left(\boldsymbol{T}(\kappa) - \lambda\mathbb{1}\right) = 0 \tag{2.30}$$

vom Grad n bestimmt werden. Die Eigenwerte λ sind im Gebiet G selbst analytische Funktionen von κ beziehungsweise Zweige analytischer Funktionen, welche ausschließlich algebraische Singularitäten aufweisen [20].
Exzeptionelle Punkte können auftreten, sobald zu einer analytischen Funktion mindestens zwei Eigenwerte zu mindestens zwei Zweigen dieser Funktion gehören. Im zweidimensionalen Parameterraum von κ sind sie an isolierten Punkten zu finden und sind Verzweigungspunktsingularitäten der analytischen Funktion. Die Eigenwerte an diesen Punkten werden kongruent, sie entarten. Die Anzahl an verschiedenen Eigenwerten wird demnach reduziert. An allen anderen, sich im Gebiet G befindenden, Punkten hängt die Anzahl der verschiedenen Eigenwerte nicht von κ ab [21].
Treten in einem zweidimensionalen Parameterraum exzeptionelle Punkte auf, hat das verschiedenen Auswirkungen:

- Bei einer vollständigen Umkreisung des exzeptionellen Punktes im Parameterraum vertauschen die entarteten Eigenwerte, welche am EP auftreten [21].

- Bei einer Umkreisung des exzeptionellen Punktes lässt sich zudem das Vertauschungsverhalten der am EP entarteten Eigenvektoren beobachten [21]. Der Unterschied von „normal“ entarteten Eigenwerten zur Entartung am EP liegt darin, dass die Dimension des Eigenraumes hier kleiner ist als an allen anderen, sich im Parameterraum befindenden, Punkten, wodurch für beide entartete Eigenwerte nur ein linear unabhängiger Eigenvektor existiert.

2.4.1 Ein einfaches Beispiel

Die lineare nicht-hermitesche Abbildung [21]

$$\boldsymbol{M}(\kappa) = \begin{pmatrix} 1 & \kappa \\ \kappa & -1 \end{pmatrix} \tag{2.31}$$

mit $\kappa \in \mathbb{C}$ dient als einfaches Beispiel, um einen exzeptionellen Punkt und dessen Verhalten genauer zu betrachten. Die Eigenwerte der Matrix sind

$$\lambda_1 = \sqrt{1+\kappa^2} \qquad \text{und} \qquad \lambda_2 = -\sqrt{1+\kappa^2}\ . \tag{2.32}$$

Diese Eigenwerte beschreiben zwei Zweige einer analytischen Funktion in κ. In diesem System existieren zwei exzeptionelle Punkte aufgrund der Entartung der Eigenwerte bei $\kappa = \pm i$. Bei diesem κ entarten zudem die Eigenvektoren

$$\boldsymbol{v}_1(\kappa) = \begin{pmatrix} -\kappa \\ 1-\sqrt{1+\kappa^2} \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad \boldsymbol{v}_2(\kappa) = \begin{pmatrix} -\kappa \\ 1+\sqrt{1+\kappa^2} \end{pmatrix}\ . \tag{2.33}$$

Es ergibt sich demnach nur ein linear unabhängiger Eigenvektor

$$\boldsymbol{v}(\pm\mathrm{i}) = \begin{pmatrix} \pm\mathrm{i} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2.34}$$

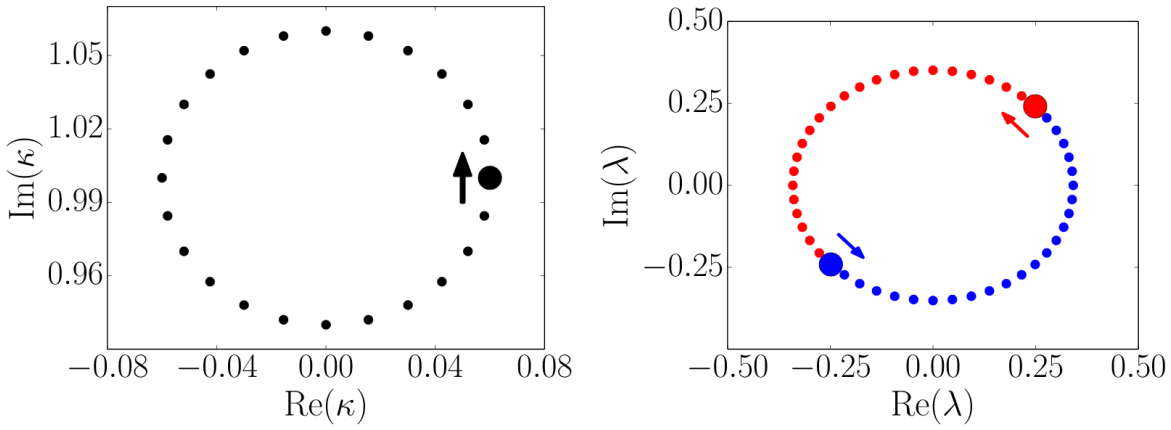
für den jeweiligen exzeptionellen Punkt. An diesem System kann das Vertauschungsverhalten der Eigenwerte in der Energieebene bei einer vollständigen Umkreisung des exzeptionellen Punktes im Parameterraum verdeutlicht werden. In Abbildung 2.4 ist das für den exzeptionellen Punkt bei $\kappa = +\mathrm{i}$ dargestellt. Dieser wurde im Parameterraum mit $\kappa(\phi) = \mathrm{i} + \rho\exp(\mathrm{i}\phi)$ umkreist. Die dicken Punkte markieren jeweils den Startpunkt und die Pfeile zeigen die Umlaufrichtung an. Für jeden Punkt im Parameterraum können die Eigenwerte nach Gleichung (2.32) berechnet werden. Aufgrund der kleinen Schritte im Parameterraum lassen sich die für jeden Schritt neu berechneten Eigenwerte den jeweiligen vorherigen zuordnen. Durch farbliche Hervorhebung der beiden Eigenwerte in Abbildung 2.4b ist deren Vertauschung deutlich zu erkennen.
Durch Einsetzen der Kreisparametrisierung in Gleichung (2.32)

$$\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{1+(\mathrm{i}+\rho e^{\mathrm{i}\phi})^2} = \pm\sqrt{\rho}e^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\sqrt{2\mathrm{i}+\rho e^{\mathrm{i}\phi}} \overset{\rho \ll 2}{\approx} \pm\sqrt{2\rho}e^{\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}e^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \tag{2.35}$$

kann dieses Vertauschungsverhalten verdeutlicht werden. Die Eigenwerte ergeben sich zu

$$\lambda_1 = \sqrt{2\rho}e^{\mathrm{i}\left(\frac{\pi}{4}+\frac{\phi}{2}\right)} \qquad \text{und} \qquad \lambda_2 = \sqrt{2\rho}e^{\mathrm{i}\left(\frac{5\pi}{4}+\frac{\phi}{2}\right)}\ . \tag{2.36}$$

Wird eine vollständige Umkreisung von $\phi = 2\pi$ eingesetzt, ist zu erkennen, dass λ_1 in λ_2 übergeht und umgekehrt. Die Eigenwerte besitzen eine Periodizität von 4π.
Der Parameterraum ist in dieser Arbeit die Feldebene, bestehend aus dem Magnet- und dem elektrischen Feld. Aufgrund der unterschiedlichen Feldstärken für die beiden verschiedenen Felder wird der EP nicht in einem Kreis umlaufen, sondern in einer Ellipse. Dadurch ändert sich die Trajektorie des jeweiligen Eigenwertes, was jedoch nichts an dem Vertauschungsverhalten ändert. Dies ist in Abbildung 2.5 dargestellt. Ist



(a) Parameterraum **(b)** Energieebene

Abbildung 2.4: (a) Der exzeptionelle Punkt ($\kappa = +\mathrm{i}$) wird im Parameterraum umkreist mit $\kappa(\phi) = \mathrm{i} + \rho \exp(\mathrm{i}\phi)$. (b) Zu jedem Punkt im Parameterraum wurden die Eigenwerte nach Gleichung (2.32) berechnet. Dabei sind die jeweiligen Startpunkte zu Beginn der Umkreisung dick markiert. Die Eigenwerte sind jeweils farblich hervorgehoben, sodass die Vertauschung deutlich zu erkennen ist. Aus Ref. [2].

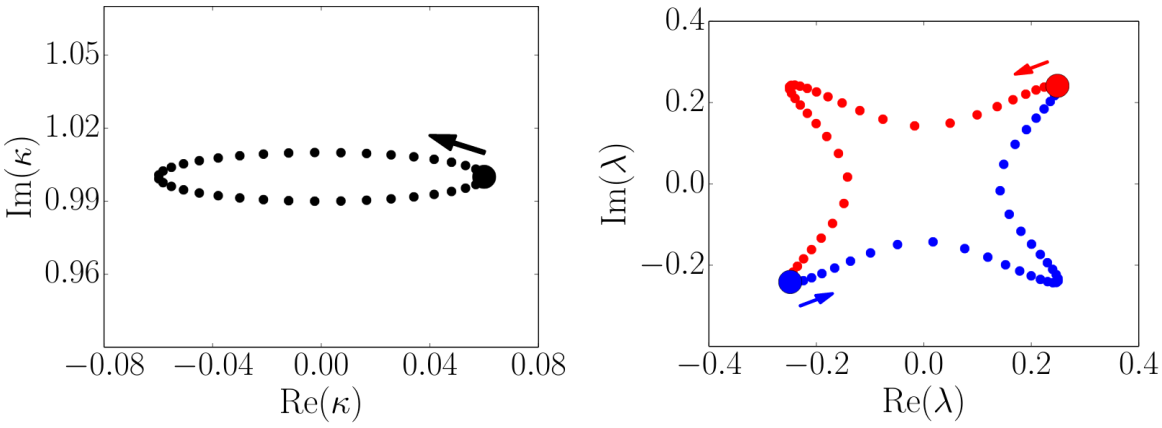
der EP das Zentrum der Ellipse, so ergibt sich in der Energieebene ein sternförmiges Muster. Ist der EP an einem beliebigen Punkt innerhalb der Ellipse, ergeben sich andere Muster, welche im weiteren Verlauf der Arbeit graphisch dargestellt werden. Je näher die Punkte im Parameterraum am exzeptionellen Punkt liegen, desto enger beieinander liegen die Eigenwerte in der Energieebene. Umgekehrt haben Eigenwerte größeren Abstand zueinander, wenn deren zugehörige Punkte im Parameterraum weit vom EP entfernt sind.

2.4.2 Dreipunktmethode

Um exzeptionelle Punkte im Parameterraum genau zu lokalisieren, wurde von Uzdin und Lefebvre im Jahre 2010 die Dreipunktmethode entwickelt [22]. Sie ist ein iterativer Algorithmus, welcher auf einem beliebig wählbaren Entwicklungspunkt (γ_0, f_0) basiert. Zunächst wird der EP durch ein zweidimensionales Matrixmodell [23]

$$\boldsymbol{M} = \begin{pmatrix} a_0 + a_\gamma(\gamma - \gamma_0) + a_f(f - f_0) & b_0 + b_\gamma(\gamma - \gamma_0) + b_f(f - f_0) \\ b_0 + b_\gamma(\gamma - \gamma_0) + b_f(f - f_0) & c_0 + c_\gamma(\gamma - \gamma_0) + c_f(f - f_0) \end{pmatrix} \tag{2.37}$$

beschrieben. Das System wird durch die äußeren Felder beeinflusst. Um dies zu berücksichtigen, werden die Matrixeinträge um den Entwicklungspunkt (γ_0, f_0) linear in den reellen



(a) Parameterraum **(b)** Energieebene

Abbildung 2.5: (a) Ellipse um den exzeptionellen Punkt ($\kappa = +\mathrm{i}$) im Parameterraum mit $\kappa(\phi) = \mathrm{i} + \rho_1 \cos(\phi) + \mathrm{i}\rho_2 \sin(\phi)$ und $\rho_1 \neq \rho_2$. (b) Zu jedem Punkt im Parameterraum wurden die Eigenwerte nach Gleichung (2.32) berechnet. Aufgrund der elliptischen Umkreisung vertauschen die Eigenwerte in einem sternförmigen Muster. Aus Ref. [2].

Feldstärken γ und f entwickelt. Die Koeffizienten sind komplex. Dieser zweidimensionale Ansatz berücksichtigt nur die beiden Zustände, welche am EP beteiligt sind. Mögliche Kopplungen zu anderen Zuständen in der Umgebung des EP werden vernachlässigt.
In dem zweidimensionalen Modell gilt für die Energieeigenwerte E_i mit $i = 1, 2$

$$\kappa \equiv E_1 + E_2 = \mathrm{tr}(\boldsymbol{M}) = A + B(\gamma - \gamma_0) + C(f - f_0) \ , \tag{2.38a}$$

$$\begin{aligned} \eta \equiv (E_1 - E_2)^2 = \mathrm{tr}^2(\boldsymbol{M}) - 4\det(\boldsymbol{M}) = D + E(\gamma - \gamma_0) + F(f - f_0) \\ + G(\gamma - \gamma_0)^2 + H(\gamma - \gamma_0)(f - f_0) + I(f - f_0)^2 \ , \end{aligned} \tag{2.38b}$$

wobei A, B, C, D, E, F, G, H und I neue komplexe Koeffizienten sind.
Für die Dreipunktmethode wird Gleichung (2.38b) linear genähert, der frei wählbare Entwicklungspunkt ($\gamma_0 = \gamma_{\mathrm{EP}}, f_0 = f_{\mathrm{EP}}$) auf den EP festgelegt und $D = 0$ gesetzt, da das auch am EP ($\eta = 0$) gelten soll. Es ist zu beachten, dass der Startpunkt für die Suche nahe genug am EP ($\gamma_{\mathrm{EP}}, f_{\mathrm{EP}}$) gewählt werden muss, da sonst der Algorithmus nicht konvergiert. Dementsprechend wird Gleichung (2.38b) zu

$$\eta = E(\gamma - \gamma_{\mathrm{EP}}) + F(f - f_{\mathrm{EP}}) \ . \tag{2.39}$$

Dabei wird angenommen, dass durch entsprechende Koeffizienten E und F das System lokal um den EP ($\gamma_{\mathrm{EP}}, f_{\mathrm{EP}}$) hinreichend gut beschrieben wird. Die Position des EP ($\gamma_{\mathrm{EP}}, f_{\mathrm{EP}}$) soll ermittelt werden.
Wie der Name der Dreipunktmethode vermuten lässt, werden an drei unterschiedlichen

Stellen im Parameterraum (γ_i, f_i) mit $i = 1, 2, 3$ die jeweiligen Eigenwertpaare $E_{1,i}$ und $E_{2,i}$ des zugehörigen exzeptionellen Punktes bestimmt. Die drei Punkte (γ_i, f_i) werden in dieser Arbeit so gewählt, dass sie auf der Ellipse um den EP im Parameterraum möglichst weit auseinander liegen. Mit Hilfe von $\eta = (E_1 - E_2)^2$ sowie dem Einsetzen der verschiedenen Punkte in Gleichung (2.39) und deren anschließender Subtraktion voneinander ergibt sich das lineare Gleichungssystem

$$\eta_2 - \eta_1 = E\,(\gamma_2 - \gamma_1) + F\,(f_2 - f_1)\ , \tag{2.40a}$$

$$\eta_3 - \eta_1 = E\,(\gamma_3 - \gamma_1) + F\,(f_3 - f_1)\ . \tag{2.40b}$$

Über dieses Gleichungssystem können die Koeffizienten E und F berechnet werden. Um die Position des exzeptionellen Punktes $(\gamma_{\mathrm{EP}}, f_{\mathrm{EP}})$ zu bestimmen, werden sowohl die berechneten Koeffizienten wie auch ein Punkt (γ_i, f_i) (hier wird beispielhaft der erste Punkt verwendet) in Gleichung (2.39) eingesetzt. Das Aufteilen dieser Gleichung in Real- und Imaginärteil erlaubt erneut die Konstruktion eines linearen Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} \mathrm{Re}(E) & \mathrm{Re}(F) \\ \mathrm{Im}(E) & \mathrm{Im}(F) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathrm{EP}} \\ f_{\mathrm{EP}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}\ , \tag{2.41a}$$

$$d_1 = \mathrm{Re}(E)\gamma_1 + \mathrm{Re}(F) f_1 - \mathrm{Re}(\eta_1)\,, \tag{2.41b}$$

$$d_2 = \mathrm{Im}(E)\gamma_1 + \mathrm{Im}(F) f_1 - \mathrm{Im}(\eta_1)\,. \tag{2.41c}$$

Dessen Lösung liefert eine Approximation für die tatsächliche Position des exzeptionellen Punktes $(\gamma_{\mathrm{EP}}, f_{\mathrm{EP}})$ im Parameterraum.
Die Dreipunktmethode konvergiert nur für sehr kleine Radien, welche in dieser Arbeit nicht erreicht wurden. Sie war dennoch ein hilfreiches Werkzeug, da der zu untersuchende Bereich stark eingegrenzt werden konnte. Bei mehrfacher Anwendung der Methode für dieselbe Ellipse wichen die ermittelten Magnetfeldwerte γ_{EP} zwar stark voneinander ab, jedoch waren die Werte für das elektrische Feld f_{EP}, von minimalen Schwankungen abgesehen, nahezu identisch.

3 Ergebnisse und Auswertung

3.1 Exzeptionelle Punkte im wasserstoffartigen Modell

In dem für diese Arbeit verwendeten Programm zur Eigenwertberechnung kann die Bandstruktur Schritt für Schritt eingeschaltet werden. Bevor dies geschieht, werden zunächst ein Teil der Ergebnisse aus Ref. [2, S. 62], welche in Tabelle 3.1 dargestellt sind, reproduziert. In dieser Masterarbeit wurden exzeptionelle Punkte bei Exzitonen in Kupferoxydul in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern im wasserstoffartigen Modell gefunden. Die Bandstruktur wurde in Ref. [2] nicht berücksichtigt. Das Reproduzieren dieser Ergebnisse dient dazu, passende Parameter zu finden, wodurch die Rechenzeit verringert und eine ausreichend gute Konvergenz erzielt werden kann. Die gefundenen exzeptionellen Punkte in Tabelle 3.1 sind in Hartree-Einheiten dargestellt. Da das für diese Arbeit verwendete Programm mit SI-Einheiten rechnet, werden die Werte mit den Faktoren aus Tabelle 3.2 umgerechnet. Die umgerechneten Werte sind

Tabelle 3.1: Die Feldstärken sowie die Energieeigenwerte der in dieser Arbeit untersuchten exzeptionellen Punkte im wasserstoffartigen Modell aus Ref. [2, S. 62] in Hartree-Einheiten.

EP	γ [10^{-3}]	f [10^{-5}]	Re(E) [10^{-2}]	Im(E) [10^{-5}]
6	0,842 021	1,962 895	−0,620 253	−3,225 076
7	0,846 007	1,410 755	−0,349 890	−2,122 072
8	0,859 863	2,005 076	−0,764 764	−0,084 618
9	0,869 331	1,714 772	−0,505 151	−0,660 290
10	0,875 280	1,075 542	−0,463 897	−0,047 545
11	0,976 997	2,338 645	−0,699 709	−0,228 187
12	1,039 547	1,258 731	−0,449 214	−0,421 932
13	1,183 887	0,885 054	−0,437 284	−0,249 923
14	1,224 893	1,183 358	−0,642 269	−0,023 338
15	1,261 664	2,724 735	−0,813 213	−4,051 234

Tabelle 3.2: Verwendete Umrechnungsfaktoren um die Werte für die exzeptionellen Punkte aus Tabelle 3.1 von Hartree-Einheiten in SI-Einheiten zu überführen.

Energie	$E = 174{,}64\,\mathrm{meV}$
Magnetfeldstärke	$\gamma = 5{,}446 \cdot 10^2\,\mathrm{T}$
Elektrische Feldstärke	$f = 1{,}588\,57 \cdot 10^6\,\mathrm{V/cm}$

Tabelle 3.3: Die Werte der exzeptionellen Punkte aus Tabelle 3.1 mit Hilfe der Umrechnungsfaktoren aus Tabelle 3.2 in SI-Einheiten umgerechnet.

EP	γ [T]	f [V/cm]	Re(E) [meV]	Im(E) [µeV]
6	0,458 565	31,181 961	−1,083 210	−5,632 273
7	0,460 735	22,410 831	−0,611 048	−3,705 987
8	0,468 281	31,852 036	−1,335 584	−0,147 777
9	0,473 438	27,240 354	−0,882 196	−1,153 130
10	0,476 677	17,085 738	−0,810 150	−0,083 033
11	0,532 073	37,151 013	−1,221 972	−0,398 506
12	0,566 137	19,995 823	−0,784 507	−0,736 862
13	0,644 745	14,059 702	−0,763 673	−0,436 466
14	0,667 077	18,798 470	−1,121 659	−0,040 757
15	0,687 102	43,284 323	−1,420 195	−7,075 075

in Tabelle 3.3 dargestellt. Die berechneten Werte dienen als Inputparameter für das Programm. Zusätzlich zum magnetischen und elektrischen Feld, müssen weitere Werte für die Hauptquantenzahlen $N_{\max}$, den Drehimpuls $F_{\max}$ und den komplexen Drehwinkel θ festgelegt werden. Da aufgrund des wasserstoffartigen Modells in Ref. [2] die Quantenzahlen $N_{\max}$ und $F_{\max}$ sehr groß gewählt werden konnten, ohne einen Anstieg der Rechenzeit, können diese nicht übernommen werden, weil sonst die Basis zu groß wäre und die Diagonalisierungen sehr lange dauern würden. Um die Rechenzeit zu minimieren, können im Programm Vereinfachungen gemacht werden. Diese Vereinfachungen sind aufgrund der ausgeschalteten Bandstruktur möglich und beeinflussen lediglich die Rechenzeit, jedoch nicht die Ergebnisse. Die magnetische Quantenzahl des Bahndrehimpulses kann auf $M_L = 0$ gesetzt werden, wodurch die magnetische Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses M_{F_t} auf $M_{F_t} = 0, \pm 1$ begrenzt wird. Zudem werden nur Zustände mit $J = 1/2$ berücksichtigt.
Die Größe der Basis ist relativ klein, da die Terme, welche aufgrund der Bandstruktur hinzukommen, ignoriert werden. Dadurch sind die Rechnungen kurz, weshalb große Werte für die maximale Hauptquantenzahl $N_{\max} = 68$ sowie den maximalen doppelten Drehimpuls $F_{\max} = 34$ gewählt werden können. Dies dient dazu, um eine gute Konvergenz zu erreichen. Der komplexe Drehwinkel wird variiert, um den bestmöglichen zu finden.

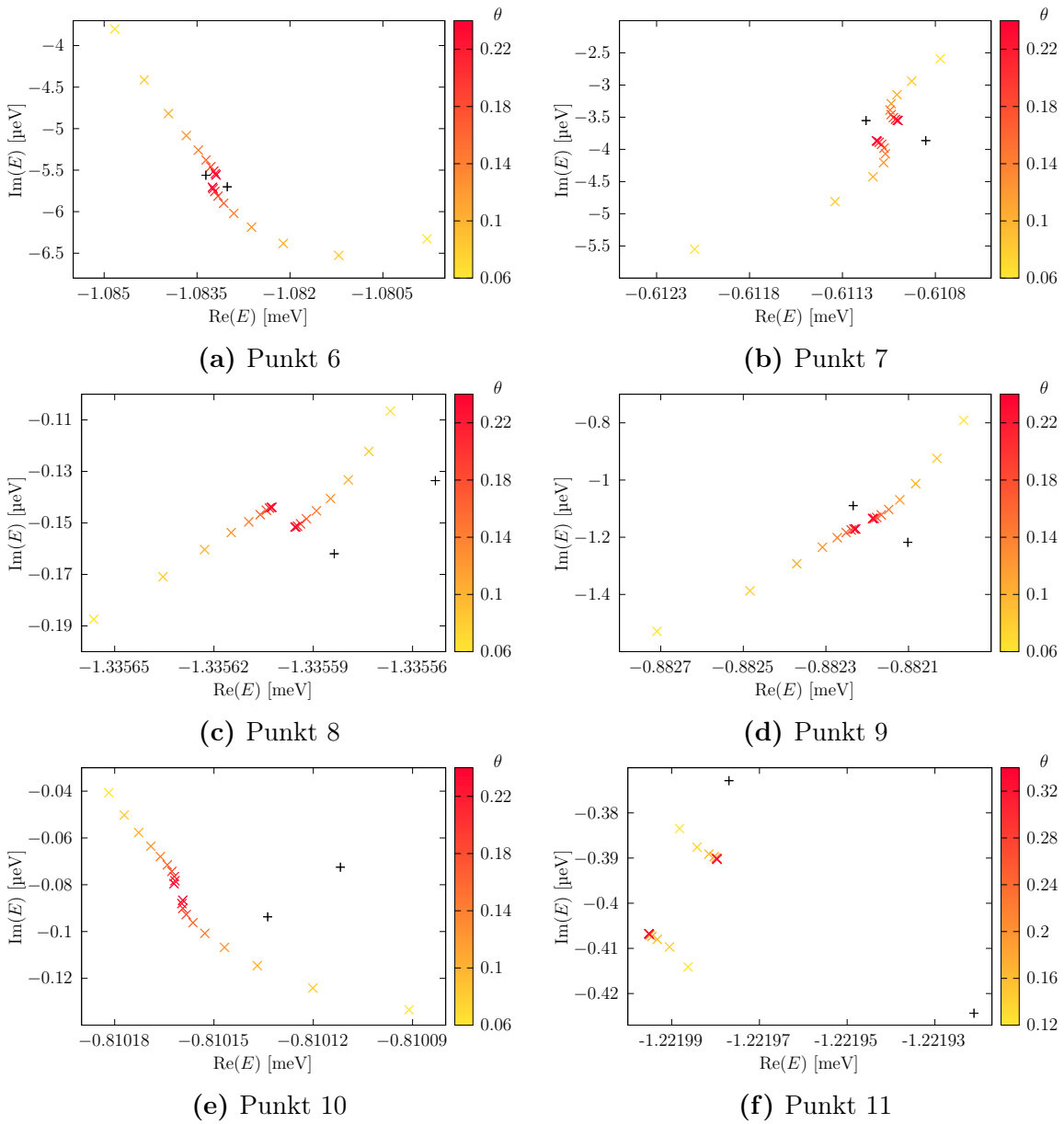
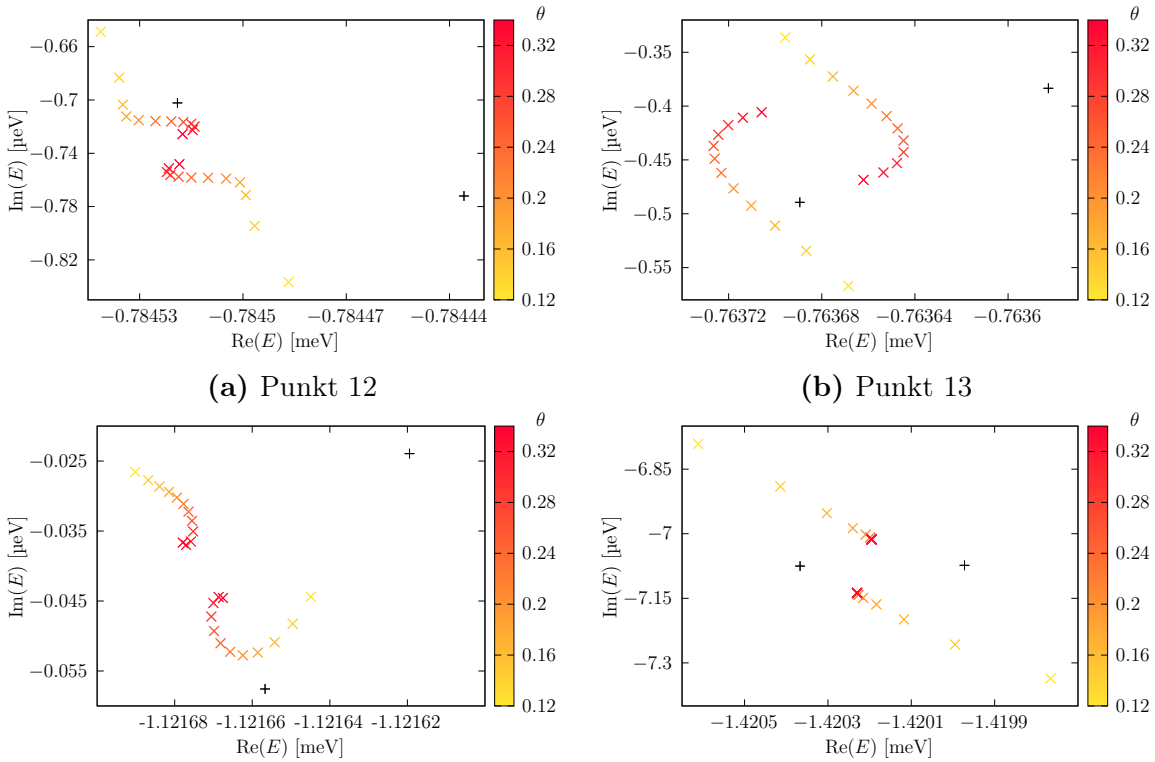


Abbildung 3.1: Reproduktion verschiedener exzeptioneller Punkte aus Tabelle 3.3. Die Eigenwertpaare für jeden exzeptionellen Punkt werden in der Energieebene dargestellt. Es werden die berechneten Werte mit den Werten von Tabelle 3.3 (schwarz) verglichen. Der komplexe Drehwinkel θ wurde dabei für die Punkte 6-10 von 0,06 (gelb) auf 0,24 (rot) in Schritten von $\Delta\theta = 0{,}02$ erhöht. Für Punkt 11 wurde er von 0,12 (gelb) auf 0,34 (rot) in Schritten von $\Delta\theta = 0{,}02$ erhöht.



(a) Punkt 12 **(b)** Punkt 13

(c) Punkt 14 **(d)** Punkt 15

Abbildung 3.2: Weitere exzeptionelle Punkte aus Tabelle 3.3 reproduziert wie bereits in Abbildung 3.1 zu sehen. Der komplexe Drehwinkel wurde von 0,12 (gelb) auf 0,34 (rot) in Schritten von $\Delta\theta = 0{,}02$ erhöht.

In den Abbildungen 3.1 und 3.2 sind die Eigenwertpaare verschiedener exzeptioneller Punkte von Tabelle 3.3 sowie die zugehörigen, in dieser Arbeit generierten, Werte in der Energieebene dargestellt. Dabei wurde der komplexe Drehwinkel für die Punkte 6-10 von 0,06 (gelb) auf 0,24 (rot) in Schritten von $\Delta\theta = 0{,}02$ erhöht. Für die Punkte 11-15 wurde er von 0,12 (gelb) auf 0,34 (rot) in Schritten von $\Delta\theta = 0{,}02$ erhöht. Es ist zu erkennen, dass mit steigendem komplexen Drehwinkel die zwei Eigenwerte eines exzeptionellen Punktes aufeinander zulaufen. Wird zudem nur einer der beiden Eigenwerte betrachtet, lässt sich eine Häufung der Eigenwerte mit steigendem Drehwinkel an einem Punkt erkennen. Eigentlich sollte der Eigenwert gegen einen Punkt konvergieren, aufgrund numerischer Ungenauigkeiten ist jedoch nur eine Häufung bis zu einem bestimmten Winkel zu sehen. Anschließend werden die Abstände zwischen den Eigenwerten für steigende Winkel wieder größer. In den Abbildungen 3.1f und 3.2c häufen sich die Punkte bis $\theta = 0{,}34$, wohingegen in Abbildung 3.2b bereits wieder größere Abstände zu erkennen sind. Nach Betrachtung der restlichen Punkte scheint $\theta = 0{,}34$ ein guter Wert für den komplexen Drehwinkel zu sein, weshalb dieser in den nachfolgenden Rechnungen

verwendet wird.

3.1.1 Vertauschung bei Umkreisung

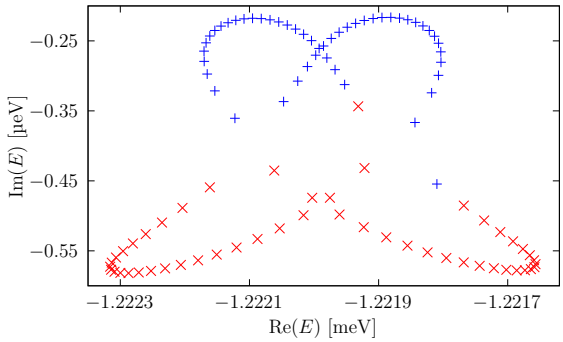
Um zu überprüfen, ob es sich bei den berechneten Eigenwerten tatsächlich um ein Eigenwertpaar eines exzeptionellen Punktes handelt, wird das Vertauschungsverhalten untersucht. Da die Rechnungen länger dauern, weil die Eigenwerte für mehrere Punkte auf der Ellipse berechnet werde müssen, können nicht alle zuvor betrachteten Punkte untersucht werden. Die Punkte werden nach hauptsächlich zwei Kriterien ausgesucht.

1. Die gefundenen Eigenwertpaare sollten eine möglichst geringe Abweichung des Real- und Imaginärteils der Energie zu den Eigenwertpaaren aus Tabelle 3.3 aufweisen.
2. In der näheren Umgebung des Eigenwertpaares sollten keine weiteren Zustände zu finden sein. Diese Zustände könnten das Erkennen der Vertauschung erschweren.

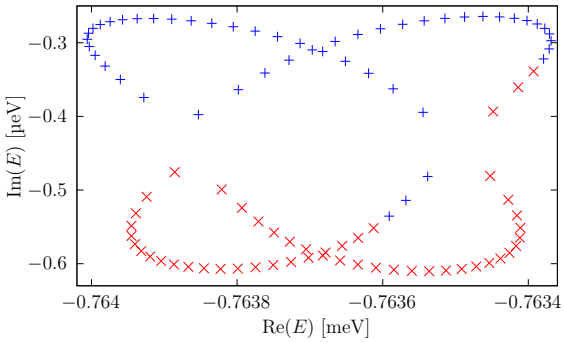
Nach Überprüfung der verschiedenen Punkte auf diese zwei Kriterien wurde für die Punkte 11, 12 und 13 eine Umkreisung durchgeführt. Diese ist in Abbildung 3.3 dargestellt. Die Trajektorien der Eigenwerte unterscheiden sich für jeden Punkt, wobei Punkt 12 im Vergleich zu den anderen eine erhöhte horizontale Achsensymmetrie aufweist. Dies deutet darauf hin, dass der exzeptionelle Punkt sich mittig in der Ellipse befindet und er somit am genauesten bestimmt ist. Da die Rechnungen noch länger dauern, sobald die Bandstruktur eingeschaltet wird, kann nur ein Punkt untersucht werden. Dieser wird Punkt 12 sein.
Um die Rechenzeit zu reduzieren, wird der Betrag des Konvergenzparameters α verstellt. Dieser wirkt sich ausschließlich auf die Konvergenz aus. Gleichzeitig wird die maximale Hauptquantenzahl $N_{\max}$ reduziert. Das Ziel ist es, die Vertauschung nach wie vor zu sehen. Außerdem sollten die berechneten Eigenwerte möglichst gar nicht von den Eigenwerten in Abbildung 3.3c abweichen. Dafür werden verschiedene Rechnungen durchgeführt, wobei für jeden Betrag von α die Hauptquantenzahl $N_{\max}$ von 25 bis 45 in Fünfer-Schritten variiert wird.
Es ließ sich beobachten, dass bei $N_{\max} \leq 25$ die Konvergenz verloren ging. Als finale Parameter, welche für die nachfolgenden Rechnungen verwendet werden, wurde $N_{\max} = 30$, $\theta = 0{,}34$ und $|\alpha| = 168$ festgelegt.

3.2 Berücksichtigung der Bandstruktur

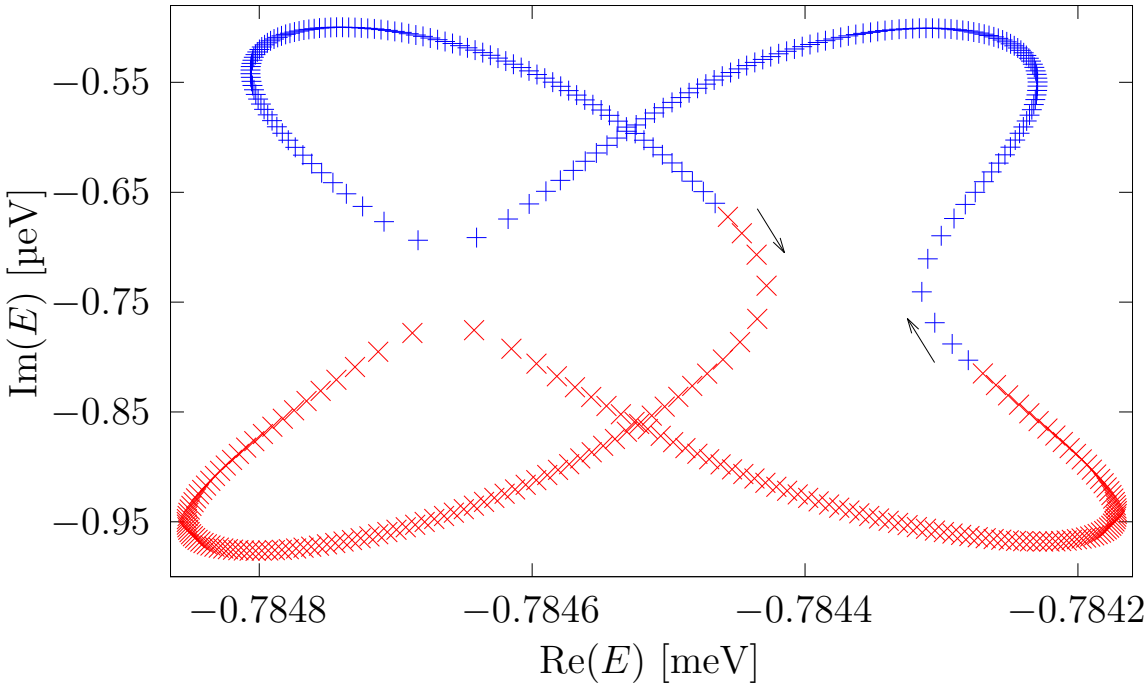
Bevor die Bandstruktur eingeschaltet wird, müssen zunächst die zuvor getroffenen Vereinfachungen betrachtet werden. Die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses kann nicht



(a) Punkt 11



(b) Punkt 13



(c) Punkt 12

Abbildung 3.3: Die Vertauschung der Eigenwerte bei einer vollständigen Umkreisung des exzeptionellen Punktes in der Feldebene. Der Startpunkt der Ellipse befindet sich bei $\gamma_S = \gamma_{EP}\,(1 + r \cdot \cos(\phi))$ und $f_S = f_{EP}\,(1 + r \cdot \sin(\phi))$ mit $\phi = 0°$ und $r = 0{,}05\,\%$ und die Ellipse wird gegen den Uhrzeigersinn abgefahren. Dabei sind die beiden Eigenwerte des Eigenwertpaares farblich hervorgehoben, um die Vertauschung zu verdeutlichen. Die beiden schwarzem Pfeile in (c) zeigen, wie sich der Eigenwert beim Abfahren der Ellipse in der Feldebene verschiebt, wobei die Pfeile bei den Eigenwerten des Startpunktes beginnen. Es sind die Umkreisungen der Punkte 11 (a), 13 (b) und 12 (c) von Tabelle 3.3 dargestellt.

mehr auf $M_{F_t} = 0, \pm 1$ begrenzt werden, sondern wird wieder auf $M_{F_t} = -F_t, -F_t + 1, \ldots, F_t - 1, F_t$ gesetzt. Zudem spielen beim Einschalten der Bandstruktur auch Zustände mit $J = 3/2$ eine Rolle. Da jedoch die Rechenzeit einer Umkreisung bei deren Berücksichtigung auf mehrere Tage ansteigt, wird die Beschränkung auf Zustände mit $J = 1/2$ beibehalten.
Im folgenden Abschnitt wird zunächst das allgemeine Vorgehen beschrieben, um den exzeptionellen Punkt beim Einschalten der Bandstruktur zu finden. Dabei wird nur der Punkt 12 aus Tabelle 3.3 genauer betrachtet, dessen Werte in Tabelle 3.4 nochmal dargestellt sind.

3.3 Bestimmung der Position eines exzeptionellen Punktes

Im Suchbereich werden Rechnungen mit großem Radius durchgeführt. Abhängig von der Größe der Ellipsen und der Größe des zu untersuchenden Bereichs werden entweder vier große Ellipsen wie in Abbildung 3.4 oder noch mehr Ellipsen, welche dann meist kleinere Radien aufweisen, berechnet. Dabei ist zu beachten, dass zwischen den Ellipsen keine Löcher sind, welche nicht durch andere Ellipsen abgedeckt werden, da sonst der exzeptionelle Punkt verpasst werden könnte. Außerdem sind Überlappungen zwischen den Ellipsen von Vorteil, da so der Bereich, in welchem sich der exzeptionelle Punkt tatsächlich befindet, weiter eingeschränkt werden kann.
Wenn der exzeptionelle Punkt in der Ellipse liegt, müssen die Eigenwerte des Eigenwertpaares vertauschen. Die berechneten Zustände jeder Ellipse werden auf die Vertauschung untersucht. Dies ist in Abbildung 3.5 zu sehen, wobei jedes Bild das Eigenwertpaar einer Ellipse aus Abbildung 3.4 zeigt. Die Ellipsen 3 und 4 zeigen eindeutig kein Vertauschungsverhalten. Demzufolge ist der exzeptionelle Punkt nicht innerhalb dieser Ellipsen. Die Eigenwertpaare der beiden anderen Ellipsen hingegen vertauschen. Demnach befindet der exzeptionelle Punkt im Überlappbereich von Ellipse 1 und 2. Um seine Position genauer zu bestimmen, wird dieser Bereich mit kleineren Ellipsen überdeckt. Dies kann beliebig oft wiederholt werden, abhängig davon, wie genau die Position des exzeptionellen Punktes bestimmt werden soll.
Die in Abschnitt 2.4.2 erklärte Dreipunktmethode kann angewendet werden, um den Suchbereich weiter einzuschränken, sobald der exzeptionelle Punkt innerhalb einer Ellipse liegt. Dazu werden drei Punkte auf Ellipse 1 oder 2 ausgewählt und die Gleichungssysteme (2.40) und (2.41) gelöst. Da die Radien der Ellipsen zu groß sind, kommen bei mehrmaliger Anwendung mit verschiedenen Punkten auf der Ellipse unterschiedliche Werte für γ_{EP} und f_{EP} heraus. Dabei schwanken vor allem die γ_{EP}-Werte sehr stark. Jedoch weichen die berechneten Werte für das elektrische Feld f_{EP} erst in der fünften signifikanten Stelle

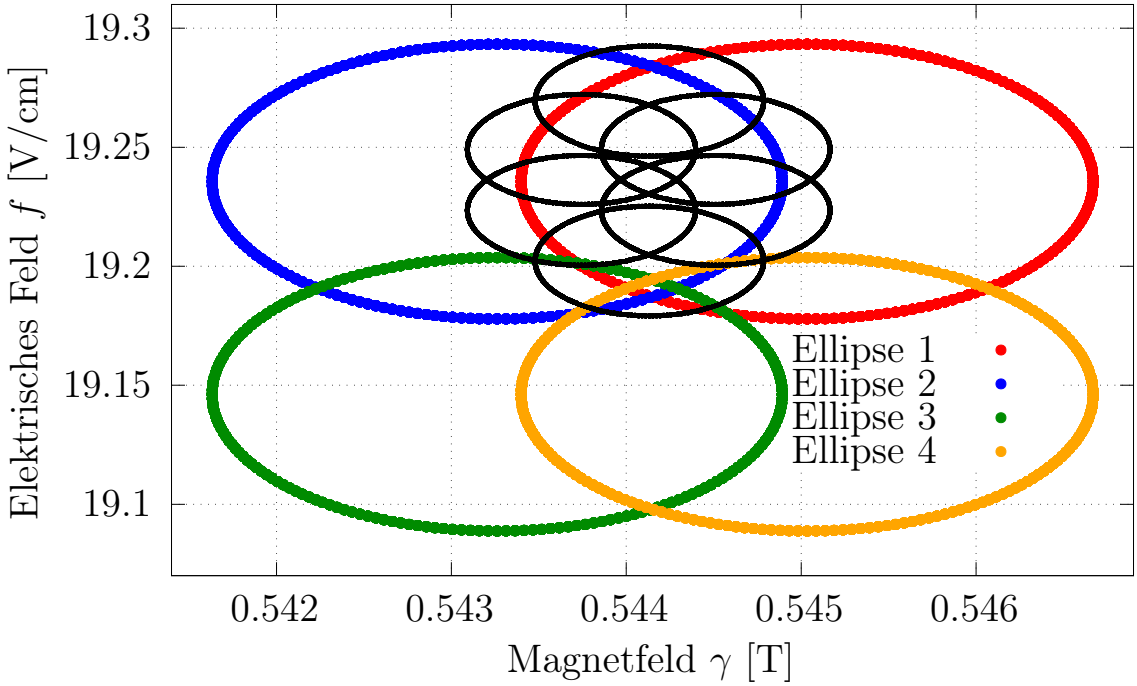
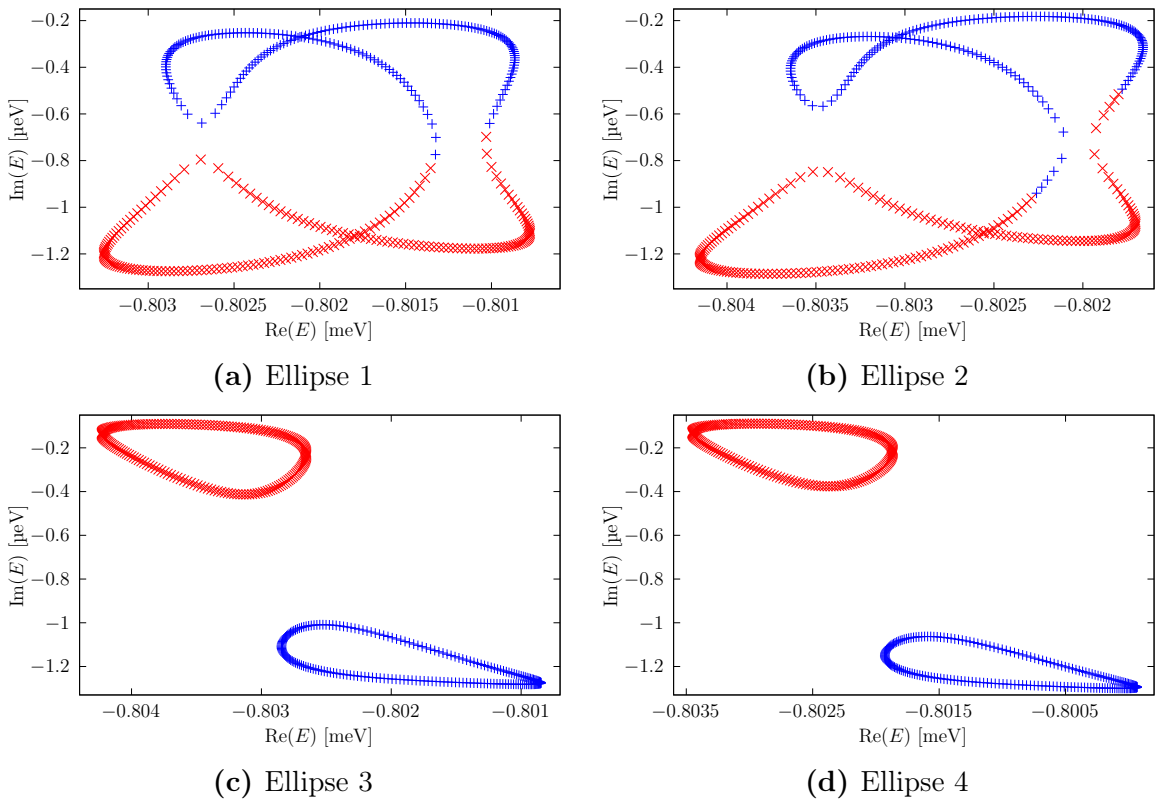


Abbildung 3.4: Mit vier großen Ellipsen in der Feldebene, welche sich überlappen, wird nach dem exzeptionellen Punkt gesucht. Zeigt das Eigenwertpaar einer Ellipse das Vertauschungsverhalten (siehe Abbildung 3.5) so befindet sich der EP innerhalb dieser Ellipse. Wie in Abbildung 3.5 zu sehen, zeigen Ellipse 1 und 2 das Vertauschungsverhalten, was bedeutet, dass der EP im Überlappbereich der beiden Ellipsen sein muss. Dieser Bereich wird mit kleineren Ellipsen abgedeckt, um die Position des exzeptionellen Punktes genauer zu bestimmen.

voneinander ab. Dadurch genügt es, Ellipsen nur entlang einer horizontalen Achse zu berechnen, da der Wert des elektrischen Feldes f_{EP} bereits relativ genau bestimmt ist. Die Dreipunktmethode ist relativ aufwendig und zeitintensiv. Sie wurde daher nur für große Suchbereiche angewendet, um die Anzahl der zu berechnenden Ellipsen zu reduzieren. Befindet sich der exzeptionelle Punkt im Überlappbereich zweier oder mehrerer Ellipsen wie beispielsweise in Abbildung 3.4, so ist der zu untersuchende Bereich bereits klein genug. In diesem Fall wird die Dreipunktmethode nicht verwendet.

3.4 Schrittweise Einschalten der Bandstruktur

Die Werte für das elektrische und magnetische Feld sowie der Real- und Imaginärteil der Energie des betrachteten Punktes bei ausgeschalteter Bandstruktur $s = 0$ sind in Tabelle



(a) Ellipse 1 **(b)** Ellipse 2

(c) Ellipse 3 **(d)** Ellipse 4

Abbildung 3.5: Die Bewegung der Eigenwerte in der Energieebene zu den vier Ellipsen aus Abbildung 3.4. Die jeweiligen Eigenwerte des Eigenwertpaares sind farblich hervorgehoben. Die Eigenwerte der Ellipsen 1 und 2 zeigen das Vertauschungsverhalten, wohingegen die Eigenwerte der Ellipsen 3 und 4 unabhängig voneinander sind. Demzufolge ist der exzeptionelle Punkt im Überlappbereich von Ellipse 1 und 2 zu finden.

3.4 aufgeführt.
Um herauszufinden, wie sich der Punkt unter Berücksichtigung der Bandstruktur verschiebt, wird der Bandstrukturparameter s in 10 %-Schritten eingeschaltet. Der Parameter s wird im Programm mit dem zweiten und dritten Luttinger-Parameter sowie den η-Werten multipliziert, wodurch die Bandstruktur gesteuert werden kann. Bei der Suche nach dem exzeptionellen Punkt bei $s = 0{,}1$ werden mehrere Ellipsen um den Punkt bei ausgeschalteter Bandstruktur $s = 0$ berechnet, dessen Werte in Tabelle 3.4 aufgeführt sind. Nachdem dieser lokalisiert wurde, wird wie in Abschnitt 3.3 vorgegangen, da nun vermutet werden kann, in welche Richtung sich der exzeptionelle Punkt verschiebt.
In Abbildung 3.6 ist zu sehen, dass der Punkt sich für $s = 0{,}1$ nach links unten in der Feldebene bewegt, also sowohl die elektrische wie auch die magnetische Feldstärke abnimmt. Es liegt nahe, dass sich der exzeptionelle Punkt mit steigendem Bandstrukturparameter s weiter in diese Richtung verschiebt. Wie in Abbildung 3.6 zu erkennen, bestätigt sich

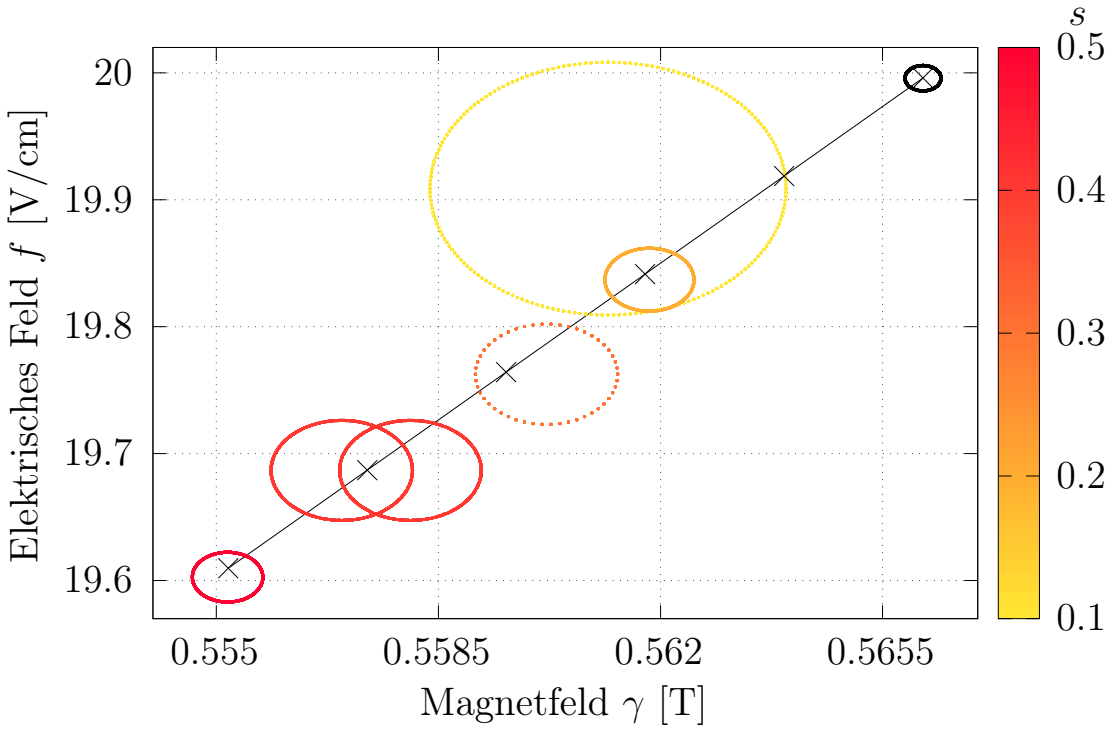


Abbildung 3.6: Die Ellipsen innerhalb welcher sich der exzeptionelle Punkt befindet bei verschiedenem Bandstrukturparameter s. Die schwarze Ellipse umkreist den exzeptionellen Punkt bei ausgeschalteter Bandstruktur. Für die weiteren Ellipsen wird der Bandstrukturparameter von $s = 0{,}1$ (gelb) auf $s = 0{,}5$ (rot) in 10 %-Schritten erhöht. Dabei verschiebt sich der Punkt entlang einer Geraden. Die eingezeichneten Kreuze markieren die ungefähre Position des exzeptionellen Punktes für die verschiedenen Bandstrukturparameter. Die Kreuze sowie die Gerade ergeben sich aus einer Schätzung und kennzeichnen nicht die exakte Position des exzeptionellen Punktes sowie dessen Verlauf bei zunehmendem s.

diese Vermutung. Der Punkt bewegt sich entlang einer Gerade. Die schwarzen Kreuze zeigen dabei die ungefähre Position des exzeptionellen Punktes für den jeweiligen Bandstrukturparameter s. Diese sowie die Gerade kennzeichnen nicht die exakte Position beziehungsweise den exakten Verlauf, sondern dienen der Veranschaulichung.
Aus zeitlichen Gründen wird versucht die eingezeichnete Linie in Abbildung 3.6 vom Wert bei $s = 0{,}5$ zum doppelten Wert hin zu extrapolieren, um so den exzeptionellen Punkt bei voll eingeschalteter Bandstruktur $s = 1$ zu finden. Dies ist in Abbildung 3.7 dargestellt. Es sind die gleichen Ellipsen wie in Abbildung 3.6 zu sehen. Zusätzlich sind drei rote Ellipsen zu erkennen, welche alle den exzeptionellen Punkt bei voll eingeschalteter Bandstruktur umkreisen. Die Farbpalette verdeutlicht dabei den Anstieg des Bandstrukturparameters von $s = 0{,}1$ (gelb) auf $s = 1$ (rot). Auch hier sind wieder Kreuze gesetzt, welche die

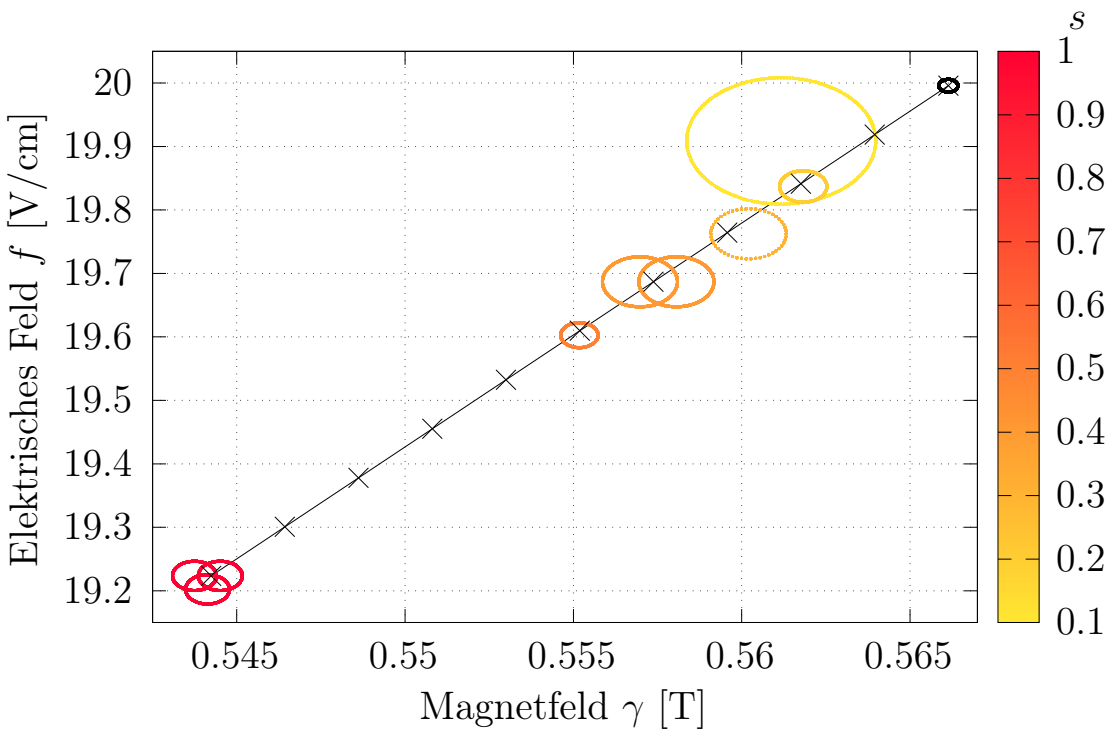


Abbildung 3.7: Die Ellipsen innerhalb welcher sich der exzeptionelle Punkt befindet bei verschiedenem Bandstrukturparameter s. Die schwarze Ellipse umkreist den exzeptionellen Punkt bei ausgeschalteter Bandstruktur. Für die weiteren Ellipsen wird der Bandstrukturparameter von $s = 0{,}1$ (gelb) auf $s = 0{,}5$ (orange) in 10 %-Schritten erhöht und anschließend die Gerade von $s = 0$ bis $s = 0{,}5$ verdoppelt, um den exzeptionellen Punkt bei voll eingeschalteter Bandstruktur $s = 1$ (rot) zu finden. Dabei verschiebt sich der Punkt entlang einer Geraden. Die eingezeichneten Kreuze markieren die ungefähre Position des exzeptionellen Punktes für die verschiedenen Bandstrukturparameter, wobei auch Kreuze für $s = 0{,}6$ bis 0,9 dargestellt sind, obwohl diese nicht explizit untersucht wurden. Die Kreuze sowie die Gerade ergeben sich aus einer Schätzung und kennzeichnen nicht die exakte Position des exzeptionellen Punktes sowie dessen Verlauf bei zunehmendem s.

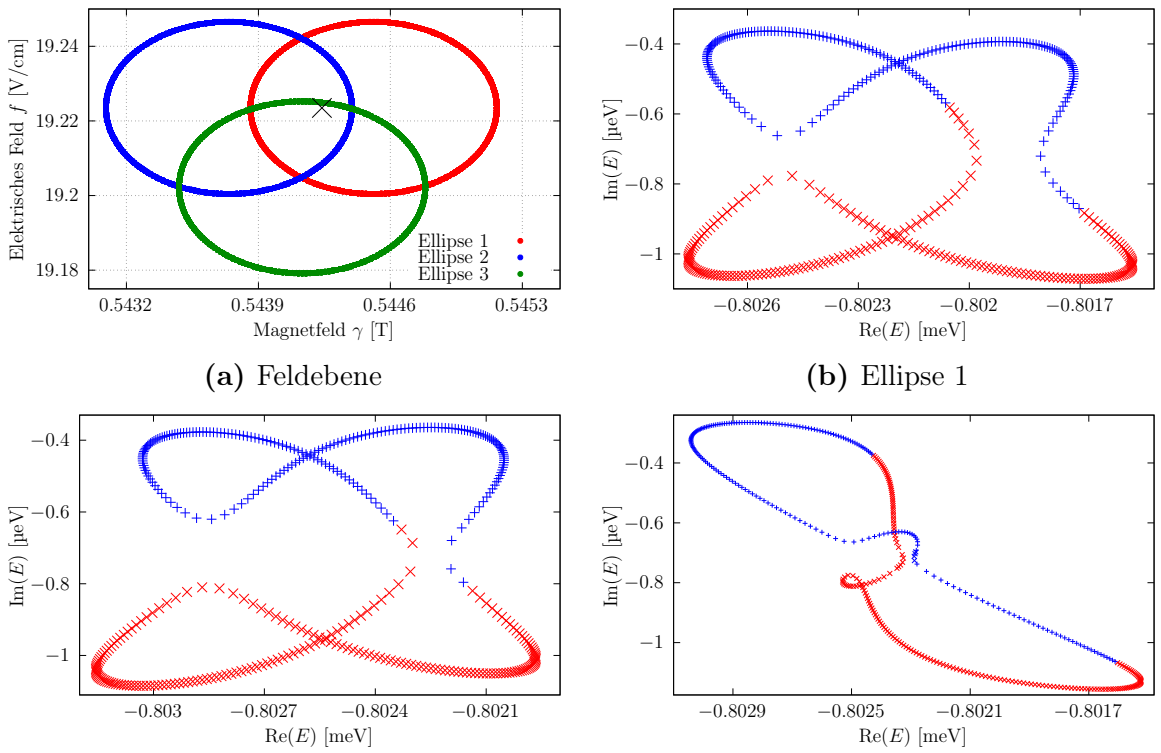
Tabelle 3.4: Die Werte von Punkt 12 ohne Berücksichtigung der Bandstruktur $s = 0$ aus Tabelle 3.3 sind zusammen mit den gefundenen Werten der vermuteten Position des exzeptionellen Punktes bei eingeschalteter Bandstruktur $s = 1$ dargestellt.

s	Re(E) [meV]	Im(E) [µeV]	γ [T]	f [V/cm]
0	−0,784 507	−0,736 862	0,566 137	19,995 823
1	−0,802 45	−0,736 86	0,544 237	19,2235

ungefähre Position des exzeptionellen Punktes für den jeweiligen Bandstrukturparameter markieren. Dabei sind auch Kreuze für $s = 0{,}6$ bis 0,9 zu sehen, welche jedoch nicht explizit untersucht wurden. Die Gerade verdeutlicht die Verschiebung des exzeptionellen Punktes bei Einschaltung der Bandstruktur. Diese sowie die schwarzen Kreuze dienen der Veranschaulichung und stellen nicht den exakten Verlauf oder die exakte Position des exzeptionellen Punktes für die jeweiligen Bandstrukturparameter s dar.

3.5 Vollständig eingeschaltete Bandstruktur

Im Folgenden soll der gefundene exzeptionelle Punkt bei vollständig eingeschalteter Bandstruktur $s = 1$ genauer betrachtet werden. Dafür sind in Abbildung 3.8 die drei Ellipsen sowie deren zugehörige Eigenwertpaare dargestellt, welche den Punkt umkreisen. Die Vertauschung der Eigenwerte von Ellipse 1 und 2 folgt dem bekannten Muster. Die Trajektorie der Eigenwerte von Ellipse 3 (siehe Abbildung 3.8d) hingegen weicht stark von diesem Muster ab. Dies ist darin begründet, dass der exzeptionelle Punkt sich höchstwahrscheinlich am oberen Rand der Ellipse befindet. Die große Abweichung der elektrischen Feldstärke von dessen tatsächlichem Wert bewirkt die veränderte Form der Vertauschung. Da zudem der exzeptionelle Punkt in Ellipse 1 eher am linken und in Ellipse 2 eher am rechten Rand liegen muss, jedoch nur ein geringer Unterschied zwischen deren Abbildungen der Energieebene besteht, lässt sich schlussfolgern, dass eine Abweichung des elektrischen Feldes vom tatsächlichen Wert einen deutlich größeren Einfluss auf die Form der Vertauschung hat als eine Abweichung des Magnetfeldes.
In Abbildung 3.8a ist zusätzlich zu den drei Ellipsen ein schwarzes Kreuz zu sehen, welches die wahrscheinliche Position des exzeptionellen Punktes markiert. Dabei handelt es sich um eine Schätzung und nicht um die tatsächliche Position des exzeptionellen Punktes. Aufgrund des Vertauschungsverhaltens aller drei Ellipsen muss sich der Punkt in deren Überlappbereich befinden. Die zuvor bereits erwähnte Abweichung der Trajektorie der Eigenwerte von Ellipse 3 schränkt den Wert des elektrischen Feldes auf den oberen Rand der dritten Ellipse ein. Um den Wert des Magnetfeldes zu bestimmen, werden die Abbildungen 3.8b und 3.8c genauer betrachtet. Es gibt zwei kritische Bereiche. Im ersten kritischen Bereich verlaufen die Eigenwerte annähernd vertikal. Für Ellipse 1 ist der Verlauf der Eigenwerte in diesem Bereich deutlich eindeutiger und der Abstand zwischen dem Eigenwertpaar größer. Ohne die farbliche Hervorhebung der Eigenwerte von Ellipse 2 hingegen, wäre die Vertauschung deutlich schwerer nachzuvollziehen. Der Verlauf der Eigenwerte im zweiten kritischen Bereich, in welchem die Eigenwerte annähernd horizontal verlaufen, kann für beide Ellipsen eindeutig nachverfolgt werden. Daraus lässt sich schließen, dass der exzeptionelle Punkt eher am rechten Rand von Ellipse 2 liegen muss. Aus diesen Schlussfolgerungen ergibt sich der eingezeichnete Punkt in



(a) Feldebene **(b)** Ellipse 1

(c) Ellipse 2 **(d)** Ellipse 3

Abbildung 3.8: (a) 3 Ellipsen in der Feldebene, welche alle den exzeptionellen Punkt bei voll eingeschalteter Bandstruktur umkreisen. Das schwarze Kreuz markiert die wahrscheinliche Position des exzeptionellen Punktes. Dabei handelt es sich nur um eine Schätzung, basierend auf dem Vertauschungsverhalten der einzelnen Ellipsen. (b), (c), (d) Die jeweiligen Eigenwerte des Eigenwertpaares sind farblich hervorgehoben. Das Vertauschungsverhalten der Eigenwerte in der Energieebene ist deutlich zu erkennen.

Abbildung 3.8a.
In Tabelle 3.4 sind die Werte des elektrischen und magnetischen Feldes sowie der Real- und Imaginärteil der Energie dieses exzeptionellen Punktes zusammen mit dem Punkt bei ausgeschalteter Bandstruktur dargestellt. Der Imaginärteil der Energie bleibt unverändert. Die Feldstärken γ und f sowie der Realteil der Energie hingegen weichen ab. Die Differenz berechnet sich zu

$$\Delta\gamma = -0{,}0219\,\mathrm{T} \quad \text{und} \quad \Delta f = -0{,}772\,323\,\mathrm{V/cm}\ . \tag{3.1}$$

Dies entspricht einer prozentualen Änderung von etwa 4 % sowohl für das Magnetfeld γ als auch für das elektrische Feld f.

4 Zusammenfassung und Ausblick

Die in der Masterarbeit von Matthias Feldmaier [2] in einem wasserstoffartigen Modell gefundenen exzeptionellen Punkte sollten in dieser Arbeit unter Berücksichtigung der Bandstruktur betrachtet werden. Da hierfür ein zu Behandlung der Bandstruktur erweiterter Algorithmus verwendet wurde, mussten zunächst die gefundenen Ergebnisse aus Ref. [2] reproduziert werden. Dies diente dazu, geeignete Konvergenzparameter zu finden. Außerdem sollte die Basisgröße und dadurch die Rechenzeit soweit reduziert werden wie nur möglich. Aufgrund der aufwendigen Rechnungen wurde ein exzeptioneller Punkt ausgewählt, welcher dann genauer untersucht wurde.
Anschließend wurde die Bandstruktur in 10 %-Schritten eingeschaltet, was über den Bandstrukturparameter s im Programm möglich war. Die Suche nach dem exzeptionellen Punkt erfolgte über die Abdeckung der vermuteten Position in der Feldebene mit Ellipsen. Wenn für das Eigenwertpaar des exzeptionellen Punktes für eine Ellipse das Vertauschungsverhalten zu beobachten war, so befand sich der Punkt innerhalb dieser Ellipse. Durch Überlappbereiche verschiedener Ellipsen, in welchen sich der exzeptionelle Punkt befand und der erneuten Berechnung mehrerer kleinerer Ellipsen, konnte die Position des Punktes genauer bestimmt werden. Zudem wurde die Dreipunktmethode verwendet, um den Wert des elektrischen Feldes einzuschränken. Dadurch konnte die Verschiebung des exzeptionellen Punktes verfolgt werden. Diese verlief entlang einer Geraden in der Feldebene, wobei sowohl die elektrische als auch die magnetische Feldstärke abnahm. Die elektrische und magnetische Feldstärke des gefundenen exzeptionellen Punktes bei vollständig eingeschalteter Bandstruktur nahmen um den näherungsweise gleichen prozentualen Anteil ab. Auch bei Berücksichtigung der Bandstruktur konnten ein exzeptioneller Punkt gefunden werden. Dieser könnte in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Bayer von der Technischen Universität Dortmund auch experimentell untersucht werden.
In dieser Arbeit wurden nur die Zustände mit $J = 1/2$ berücksichtigt. Für zukünftige Untersuchungen können zusätzlich die Zustände mit $J = 3/2$ beachtet werden, um eine Grundlage für weitere mögliche experimentelle Untersuchungen zu schaffen. Zudem könnten die Oszillatorstärken des exzeptionellen Punktes betrachtet werden. Diese gibt Auskunft, wie stark die Zustände des exzeptionellen Punktes überhaupt angeregt werden. Daraus lässt sich schließen, ob sich dieser exzeptionelle Punkt für experimentelle Untersuchungen eignet.

Literatur

[1] Holger Catarius. „Exceptional points in atomic spectra and Bose-Einstein condensates“. Diss. Universität Stuttgart, 2008. DOI: 10.18419/opus-4844.

[2] Matthias Feldmaier. *Untersuchung exzeptioneller Punkte bei Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern.* Masterarbeit, Universität Stuttgart (2015). DOI: 10.18419/opus-10128.

[3] Matthias Schmidt. *Hoch angeregte Resonanzen im Absorptionsspektrum von Kupferoxydul in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern.* Bachelorarbeit, Universität Stuttgart (2018). DOI: 10.18419/opus-10184.

[4] Patric Rommel. *Modell mit Mastergleichung zur Beschreibung der Exziton-Phonon-Wechselwirkung in Cu_2O.* Masterarbeit, Universität Stuttgart (2017). DOI: 10.18419/opus-10096.

[5] Patrik Zielinski. *Berechnung hochangeregter Exzitonen in elektrischen und magnetischen Feldern mit der Methode der komplexen Koordinatenrotation.* Masterarbeit, Universität Stuttgart (2018). DOI: 10.18419/opus-10130.

[6] Frank Schweiner, Jörg Main, Matthias Feldmaier, Günter Wunner und Christoph Uihlein. „Impact of the valence band structure of Cu_2O on excitonic spectra“. In: *Phys. Rev. B* 93 (19 Mai 2016), S. 195203. DOI: 10.1103/PhysRevB.93.195203.

[7] Frank Schweiner, Jörg Main, Günter Wunner, Marcel Freitag, Julian Heckötter, Christoph Uihlein, Marc Aßmann, Dietmar Fröhlich und Manfred Bayer. „Magnetoexcitons in cuprous oxide“. In: *Phys. Rev. B* 95 (3 Jan. 2017), S. 035202. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.035202.

[8] J. E. Avron, I. W. Herbst und B. Simon. „Separation of center of mass in homogeneous magnetic fields“. In: *Annals of Physics* 114.1 (1978), S. 431–451. ISSN: 0003-4916. DOI: 10.1016/0003-4916(78)90276-2.

[9] P. Schmelcher und L. S. Cederbaum. „Regularity and chaos in the center of mass motion of the hydrogen atom in a magnetic field“. In: *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters* 24.4 (Dez. 1992), S. 311–323. ISSN: 1431-5866. DOI: 10.1007/BF01426678.

[10] T. Kazimierczuk, D. Fröhlich, S. Scheel, H. Stolz und M. Bayer. „Giant Rydberg excitons in the copper oxide Cu_2O“. In: *Nature* 514.7522 (Okt. 2014), S. 343–347. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature13832.

[11] 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“. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 9.8 (1976), S. 1429. URL: http://stacks.iop.org/0022-3719/9/i=8/a=014.

[12] O. Madelung, U. Rössler und M. Schulz, Hrsg. *Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1998.

[13] F. Schöne, S.-O. Krüger, P. Grünwald, H. Stolz, S. Scheel, M. Aßmann, J. Heckötter, J. Thewes, D. Fröhlich und M. Bayer. „Deviations of the exciton level spectrum in Cu_2O from the hydrogen series“. In: *Phys. Rev. B* 93 (7 Feb. 2016), S. 075203. DOI: 10.1103/PhysRevB.93.075203.

[14] S. L. Artyukhin. „Frustrated magnets: non-collinear spin textures, excitations and dynamics“. Diss. Rijksuniversiteit Groningen, 2012.

[15] J. Zamastil, F. Vinette und M. Šimánek. „Calculation of atomic integrals using commutation relations“. In: *Phys. Rev. A* 75.2, 022506 (Feb. 2007), S. 022506. DOI: 10.1103/PhysRevA.75.022506.

[16] M. A. Caprio, P. Maris und J. P. Vary. „Coulomb-Sturmian basis for the nuclear many-body problem“. In: *Phys. Rev. C* 86 (3 Sep. 2012), S. 034312. DOI: 10.1103/PhysRevC.86.034312.

[17] R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen und C. Yang. *ARPACK Users' Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicitly Restarted Arnoldi Methods*. Society for Industrial und Applied Mathematics, 1998. DOI: 10.1137/1.9780898719628.

[18] Nimrod Moiseyev. „Quantumtheory of resonances: calculating energies, widths and cross-sections by complex scaling“. In: *Physics Reports* 302 (1998).

[19] William P. Reinhardt. „Complex coordinates in theory of atomic and molecular structure and dynamics“. In: *Annual Review of Physical Chemistry* 33 (1982).

[20] K. Knopp und F. Bagemihl. *Theory of functions*. Band 1. Courier Corporation, 1996.

[21] T. Kato. *Perturbation theory for linear operators*. Berlin: Springer-Verlag, 1966.

[22] Raam Uzdin und Roland Lefebvre. „Finding and pinpointing exceptional points of an open quantum system“. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 43 (2010).

[23] W-D. Heiss. „Repulsion of resonance states and exceptional points“. In: *Phys. Rev. E* 61 (2000).

Danksagung

An dieser Stelle will ich mich bei allen bedanken, die mir beim Schreiben dieser Arbeit geholfen haben. Zunächst einmal möchte ich bei meinen Kollegen und Freunden des Instituts für Theoretische Physik 1 für das hilfsbereite Miteinander und die angenehme Atmosphäre bedanken. Dabei geht ein besonderer Dank an Prof. Dr. Jörg Main und an Patric Rommel, die mir das Schreiben dieser Arbeit erst ermöglicht und mich dabei immer unterstützt haben.
Außerdem will ich meiner Familie und meinen Freunden danken, welche die Arbeit Korrektur gelesen haben.

Erklärung

Ich versichere,

- dass ich diese Bachelorarbeit selbstständig 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,
- und dass das elektronische Exemplar mit den anderen Exemplaren übereinstimmt.

Stuttgart, den 21. Oktober 2020 *Patrick Egenlauf*