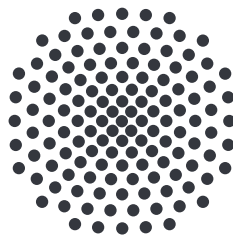


# Berechnung hochangeregter Exzitonen in elektrischen und magnetischen Feldern mit der Methode der komplexen Koordinatenrotation

Masterarbeit von  
**Patrik Zielinski**

16. November 2018

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



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



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
1.1	Motivation und Einführung in das Thema . . . . .	5
1.2	Aufbau der Arbeit . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1	Exzitonen . . . . .	7
2.2	Kupferoxydul $\text{Cu}_2\text{O}$ . . . . .	8
2.2.1	Hamiltonian . . . . .	9
2.2.2	Elektrisches und magnetisches Feld . . . . .	11
2.2.3	Gesamter Hamiltonian . . . . .	12
2.3	Resonanzen und komplexe Koordinatenrotation . . . . .	15
2.3.1	Resonanzen . . . . .	15
2.3.2	Komplexe Koordinatenrotation . . . . .	16
2.4	Basis . . . . .	18
2.5	Relative Oszillatorstärke . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Programmaufbau und Bestimmung der Resonanzen</b>	<b>23</b>
3.1	Programmaufbau . . . . .	23
3.2	Bestimmung der Resonanzen . . . . .	25
<b>4</b>	<b>Exzitonen in elektrischen und magnetischen Feldern</b>	<b>29</b>
4.1	Exzitonen in elektrischem Feld in [001]-Richtung . . . . .	29
4.2	Parallele Felder, elektrisches und magnetisches Feld in [001]-Richtung . . . . .	33
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>43</b>
<b>6</b>	<b>Anhang 1</b>	<b>45</b>
6.1	Resonanzen und Oszillatorstärken für das externe elektrische Feld . . . . .	45
6.2	Resonanzen und Oszillatorstärken paralleler Felder . . . . .	49
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>57</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>59</b>



# 1 Einleitung

## 1.1 Motivation und Einführung in das Thema

Exzitonen sind Quasiteilchen. Sie kommen in Halbleitern und Isolatoren vor. Sie bestehen aus einem positiv geladenen Loch im Valenzband und einem negativ geladenen Elektron im Leitungsband. Dementsprechend lassen sie sich ähnlich wie ein Wasserstoffatom beschreiben. Exzitonen können besonders gut in Kupferoxydul ( $\text{Cu}_2\text{O}$ ) untersucht werden, da dieser Halbleiter eine hohe Rydbergenergie besitzt. So konnte 2014 das Exzitonenpektrum in Kupferoxydul bis zu der Hauptquantenzahl  $n = 25$  gemessen werden [1].

Mit Hilfe von hochauflösender Absorptionsspektroskopie und angelegten elektrischen Feldern konnten F. Schöne et al. [2] zeigen, dass die Abweichungen vom Wasserstoffmodell hauptsächlich durch die nicht parabelförmige Bandstruktur hervorgerufen werden. Weiter wurde von J. Heckötter et al. [3] das Spektrum der Exzitonen in elektrischen Feldern untersucht. Ferner berechnete F. Schweiner in seiner Doktorarbeit [4] unter anderem den Einfluß von Magnetfeldern auf das Spektrum der Exzitonen in Kupferoxydul. Dabei berücksichtigte er die kubische Valenzbandstruktur und konnte mit Hilfe der experimentellen Daten von [1] die entsprechenden Parameter zur Berechnung des Absorptionsspektrums ermitteln. Die hier erwähnten Experimente und Berechnungen untersuchten nur die gebundenen Zustände. So können quasigebundene Zustände durch Anlegen elektrischer Felder entstehen, sogenannte Resonanzen. Im Rahmen dieser Arbeit werden mit Hilfe der komplexen Koordinatenrotation die Positionen und die Linienbreiten der Resonanzen in Kupferoxydul berechnet. Dazu werden vier verschiedene elektrische Feldstärken angelegt. Ferner werden die relativen Oszillatorstärken für zirkular polarisiertes Licht ( $\sigma^+$  und  $\sigma^-$ ) berechnet, um damit dann das Spektrum zu ermitteln. Zusätzlich wird der Einfluß eines zum elektrischen Feld parallel angelegten magnetischen Feldes untersucht. Auch hier werden die Resonanzen für verschiedene Feldstärken ermittelt und die Oszillatorstärken für zirkular polarisiertes Licht kalkuliert. Dabei dienen die Ergebnisse von F. Schweiner als Grundlage, wobei das von ihm verwendete Programm mit der komplexen Rotation erweitert wurde.

Mit der komplexen Rotation können zeitlich begrenzte quantenmechanische Zustände (Resonanzen) gefunden werden. Ein einfaches Beispiel ist der radioaktive Zerfall. Der Atomkern ist für eine bestimmte Zeit stabil und zerfällt dann in zwei Untersysteme (neuer Atomkern und radioaktives Teilchen). Diese Methode führt zu komplexen Energieeigenwerten [5, 6]. In Folge dessen sind alle Operatoren nicht mehr hermitesch. Der Imaginärteil steht direkt mit der Lebensdauer eines solchen Zustandes in Verbindung.

Ist sein Betrag groß, ist der Zustand kurzlebig und entsprechend langlebig wenn dieser klein ist [5, 6].

Im Falle von Exzitonen muss die Potentialbarriere des Coulomb-Potentials erniedrigt werden. Hierdurch können, aufgrund des Tunneleffektes Resonanzen entstehen. Praktischerweise lässt sich dies durch Anlegen eines äußeren elektrischen Feldes bewerkstelligen.

In der vorliegenden Arbeit wird die Matrixschreibweise der Schrödingergleichung verwendet. Als Basis wird, wie auch in [4] die Coulomb-Sturm-Basis genutzt. Das entstehende generalisierte Eigenwertproblem wird mit der entsprechenden LAPACK-Routine gelöst. Anschließend lassen sich mit den berechneten Eigenwerten und Eigenvektoren die relativen Oszillatorstärken der jeweiligen Zustände berechnen. Die Oszillatorstärke gibt in diesem Fall an, wie stark die Exzitonen mit dem eingestrahlt Licht koppeln bzw. wechselwirken.

## 1.2 Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 werden die benötigten Grundlagen erörtert. So wird Anhand des einfach zugänglichen wasserstoffähnlichen Modells für Exzitonen dessen Eigenschaften beschrieben. Im Anschluss daran werden die Charakteristika von Kupferoxydul (Kristallgitter, Bandstruktur) vorgestellt. Der Hamiltonian wird mit der komplexen Bandstruktur und dem elektrischen und magnetischen Feld erweitert. Als nächstes wird erläutert, was Resonanzen sind und wie sie mit Hilfe der komplexen Koordinatenrotation gefunden werden können. Dieses Konzept wird zum einen an dem Beispiel des Wasserstoffatoms und zum anderen an dem invertierten harmonischen Oszillator verdeutlicht. Jetzt wird der Hamiltonian mit der komplexen Koordinatenrotation erweitert. Im Anschluss werden die Terme und Quantenzahlen der Coulomb-Sturm-Basis ermittelt. Am Ende dieses Kapitels werden die benötigten Gleichungen zur Berechnung der Oszillatorstärken vorgestellt. Zuletzt wird gezeigt, wie das Spektrum berechnet wird.

Im dritten Kapitel wird der Programmaufbau und die erforderlichen Erweiterungen des Programms, die bei der komplexen Koordinatenrotation beachtet werden müssen, sowie wie gewährleistet wird, dass diese auch die richtigen Ergebnisse liefern, beschrieben. Des Weiteren wird der Ablauf, in welcher Reihenfolge was berechnet wird vorgestellt. Im Unterkapitel 3.2 wird erklärt wie die Resonanzen ermittelt wurden.

In Kapitel 4 werden die Ergebnisse für das elektrische Feld und für die parallelen Felder diskutiert und miteinander verglichen. Dabei werden für jeweils vier verschiedene Feldstärken und für  $\sigma^+$ ,  $\sigma^-$  polarisiertes Licht Resonanzen bestimmt.

Das fünfte Kapitel fasst die Ergebnisse zusammen und gibt mögliche Ausblicke was als nächstes untersucht werden kann.

# 2 Grundlagen

## 2.1 Exzitonen

Festkörper können thermisch oder durch Absorption von Photonen angeregt werden. Die angeregten Elektronen werden aus dem Valenzband in das Leitungsband angehoben. Im Valenzband bleiben positiv geladene Löcher zurück, welche mit den negativ geladenen Elektronen im Leitungsband wechselwirken. Die Elektron-Loch-Paare können als Quasiteilchen beschrieben werden, die sogenannten Exzitonen. Der entsprechende Hamiltonian, für ein solches Paar lautet [7]:

$$H_{e-h} = E_g + \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e^*} + \frac{\mathbf{p}_h^2}{2m_h^*} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e|} \quad (2.1)$$

Dabei ist  $E_g$  die Energie der Bandlücke zwischen Valenz- und Leitungsband,  $\mathbf{p}_e$  der Impuls des Elektrons und  $\mathbf{p}_h$  der Impuls des Lochs. Der vierte Term von Gl.(2.1) stellt die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektron und Loch dar, wobei  $e$  die Elementarladung,  $|\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e|$  der Abstand zwischen den beiden und  $\epsilon_0$  die elektrische Feldkonstante ist. Der Einfluß anderer Valenz- und Leitungsbander wird über  $\epsilon$ , die Dielektrizitätskonstante beschrieben [7]. Für ein Zwei-Bändermodell (Valenz- und Leitungsband) ist  $\epsilon = 1$ . Die Massen  $m_e^*$  und  $m_h^*$  sind die jeweiligen effektiven Massen des Elektrons und des Lochs. Sie beschreiben die Reaktion dieser Teilchen auf ein externes Feld und werden über den Tensor,

$$((m^*(\mathbf{k})^{-1}))_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} \quad (2.2)$$

berechnet. Aus Gl.(2.2) geht hervor, dass die effektive Masse der Krümmung der Bänder  $E_n(\mathbf{k})$  entspricht. Für parabelförmige Umgebungen in der Bandstruktur (lokale Minima/Maxima) ist die effektive Masse konstant [8].

Der Hamiltonian Gl. (2.1) entspricht einem Zweikörperproblem. Durch Einführen von Relativ- und Schwerpunktskoordinaten,

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e, \quad \mathbf{R} = \frac{m_h^* \mathbf{r}_h + m_e^* \mathbf{r}_e}{m_h^* + m_e^*}, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p}_h + \mathbf{p}_e, \quad \mathbf{p} = \frac{m_h^* \mathbf{p}_e - m_e^* \mathbf{p}_h}{m_h^* + m_e^*}, \quad (2.3)$$

sowie der effektiven Gesamtmasse  $M^*$  und der effektiven reduzierten Masse  $\mu^*$ , mit

$$M^* = m_h^* + m_e^*, \quad \mu^* = \frac{m_h^* m_e^*}{M^*}, \quad (2.4)$$

ergibt sich der neue Hamiltonian,

$$H_{e-h} = E_g + \frac{\mathbf{P}^2}{2M^*} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu^*} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\mathbf{r}|}. \quad (2.5)$$

Mit Hilfe des Ansatzes [4]

$$\psi_{nLM\mathbf{K}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} F_{nLM}(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

lässt sich die entsprechende zeitunabhängige Schrödingergleichung lösen. Dabei ist  $F_{nLM}(\mathbf{r})$  die Lösung der Relativbewegung,  $n$  die Hauptquantenzahl,  $L$  die Drehimpulsquantenzahl,  $M$  die magnetische Quantenzahl und  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_e - \mathbf{k}_h$  der Wellenvektor des Exzitons. Die Eigenenergien lauten [4, 9]

$$E_{n\mathbf{K}} = E_g + \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2M^*} - \frac{R_{\text{exc}}}{n^2}. \quad (2.7)$$

Die exzitonische Rydbergenergie  $R_{\text{exc}}$  skaliert, da es sich um ein wasserstoffähnliches System handelt, mit der Rydbergenergie  $R_y$  des Wasserstoffatoms. Dasselbe gilt für den exzitonischen Bohrradius  $a_{\text{exc}}$ ,

$$R_{\text{exc}} = \frac{R_y \mu^*}{m_e \epsilon^2}, \quad a_{\text{exc}} = \frac{a_0 m_e}{\mu^*}, \quad (2.8)$$

mit  $m_e$  der Elektronenmasse. Für Halbleiter liegen die beiden Werte in den Bereichen [9],

$$\begin{aligned} 1 \text{ meV} &\leq R_{\text{exc}} \leq 200 \text{ meV} \ll E_g, \\ 50 \text{ nm} &\gtrsim a_0 \geq 1 \text{ nm} > a_{\text{Gitter}}. \end{aligned}$$

Die exzitonische Rydberenergie  $R_{\text{exc}}$  ist geringer als die Energielücke. Der exzitonische Bohrradius  $a_0$  ist größer als die Gitterkonstante. Dadurch können die effektiven Massen und die Dielektrizitätskonstante als homogen angesehen werden [4, 9]. Die hier behandelten Exzitonen sind Mott-Wannier-Exzitonen [10], welche hauptsächlich in Halbleitern vorkommen. Neben den Mott-Wannier-Exzitonen gibt es noch Frenkel-Exzitonen, welche in Isolatoren oder organischen Kristallen auftreten. Das Elektron-Loch-Paar ist bei diesen auf eine Einheitszelle beschränkt [9]. Im Weiteren Verlauf dieser Arbeit werden alle Exzitonen als Mott-Wannier-Exzitonen behandelt.

## 2.2 Kupferoxydul $\text{Cu}_2\text{O}$

Kupferoxydul ist ein roter Feststoff, welcher ein Halbleiter ist. Zur Untersuchung von Exzitonen eignet sich Kupferoxydul besonders gut. So konnte durch ein Laserabsorptionsexperiment Exzitonenzustände bis  $n = 25$  gemessen werden [1]. Abbildung (2.1a)



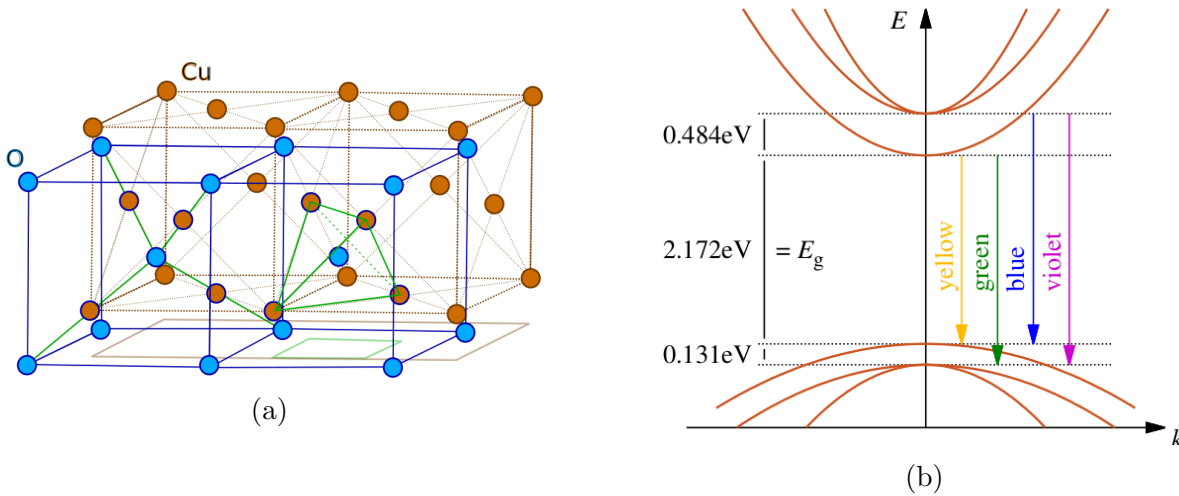


Abbildung 2.1: (a): Kristallgitter von  $\text{Cu}_2\text{O}$ . Die Sauerstoffionen sind in einem BCC Gitter und die Kupferionen sind in einem FCC Gitter angeordnet. Beide Gitter sind um  $1/4$  ihrer Raumdiagonalen ineinander verschoben. (b) Vereinfachte Darstellung der Bandstruktur von  $\text{Cu}_2\text{O}$  um das Zentrum der ersten Brillouin-Zone. Es können vier Exzitonenzustände angeregt werden. Die Farbe entspricht der jeweiligen Wellenlänge, welche zum anregen benötigt wird. Bearbeitet aus [4].

zeigt das Kristallgitter. Die Oxidionen bilden ein kubisch raumzentriertes Untergitter (BCC) während die Kupferionen ein kubisch flächenzentriertes Untergitter (FCC) bilden. Beide Gitter sind jeweils um  $1/4$  ihrer Raumdiagonalen ineinander verschoben. Eine Einheitszelle besteht aus sechs Ionen, vier Kupfer- und zwei Sauerstoffionen. Die Bandstruktur ist in Abbildung (2.1b) abgebildet. Kupferoxydul ist ein direkter Halbleiter. Es können vier Arten von Exzitonen angeregt werden, die gelben (yellow), die grünen (green), die blauen (blue) und die violetten (violet). Die Farben entsprechen den jeweiligen Wellenlängen des Lichtes, die benötigt werden, um den Zustand anregen zu können.

### 2.2.1 Hamiltonian

Die Exzitonen in Kupferoxydul können aufgrund der Bandstruktur nicht mehr genau mit dem wasserstoffähnlichen Hamiltonian Gl. (2.1) beschrieben werden. Der Grund dafür ist das entartete Valenzband (Abb. 2.1b). Das Band ist aufgrund seiner Symmetrie am  $\Gamma$ -Punkt dreifach entartet, dies wird über den Quasispin  $I = 1$  beschrieben. Mit der Spin-Bahn-Kopplung zwischen dem Quasispin und dem Lochspin  $S_h$  im Valenzband teilt sich diese in ein höher liegendes zweifach entartetes und ein vierfach entartetes, tiefer liegendes Band. Aufgrund der fehlenden Kugelsymmetrie des Kristalls und der Interbandwechselwirkung weichen die Bänder von der Parabelform ab [11].

Die kinetische Energie des Elektrons ist durch den Hamiltonian,

$$H_e(\mathbf{p}_e) = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e^*} \quad (2.9)$$

gegeben. Dabei ist  $m_e^*$  die effektive Masse des Elektrons. Der Hamiltonian des Lochs ist wegen den Abweichungen von der Parabelform und den Entartungen durch den komplizierteren Hamiltonian [11, 12]

$$\begin{aligned} H_h(\mathbf{p}_h) = H_{\text{SO}} + & \left( \frac{1}{2\hbar^2 m_e} \right) \{ \hbar^2 (\gamma_1 + 4\gamma_2) \mathbf{p}_h^2 + 2(\eta_1 + 2\eta_2) \mathbf{p}_h^2 (\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}_h) \\ & - 6\gamma_2 (p_{h1}^2 \mathbf{I}_1^2 + \text{c.p.}) - 12\eta_2 (p_{h1}^2 \mathbf{I}_1 \mathbf{S}_{h1} + \text{c.p.}) \\ & - 12\gamma_3 (\{p_{h1}, p_{h2}\} \{ \mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2 \} + \text{c.p.}) \\ & - 12\eta_3 (\{p_{h1}, p_{h2}\} (\mathbf{I}_1 \mathbf{S}_{h2} + \mathbf{I}_2 \mathbf{S}_{h1}) + \text{c.p.}) \}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

mit der Schreibweise  $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$ , dem Antikommutator  $\{a, b\} = \frac{1}{2}(ab + ba)$  und c.p. für zyklische Permutation gegeben. Die Spin-Bahn-Kopplung wird mit dem Term [11, 12]

$$H_{\text{SO}} = \frac{2}{3} \Delta \left( 1 + \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}_h \right) \quad (2.11)$$

berücksichtigt. Dabei ist  $\Delta$  die Energielücke zwischen dem oberen, zweifach entarteten und dem unteren vierfach entarteten Valenzband. Der Lochspin  $\mathbf{S}_{hj}$  wird mit Hilfe der Spin-1/2-Matrizen und der Quasispin  $I = 1$  über [11]

$$\mathbf{I}_k = \sum_{l,m} -i\hbar \epsilon_{klm} (\hat{\mathbf{e}}_l \otimes \hat{\mathbf{e}}_m), \quad (2.12)$$

mit den Einheitsvektoren  $\hat{\mathbf{e}}$  und dem Epsilon-Tensor  $\epsilon_{klm}$  beschrieben. Die Vektoren  $\mathbf{I}$  und  $\mathbf{S}_h$  bestehen aus den jeweiligen Matrizen. Des Weiteren gilt [12],

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}_h = \sum_{j=1}^3 \mathbf{I}_j \mathbf{S}_{hj}. \quad (2.13)$$

Das anisotropische Verhalten der effektiven Masse des Lochs in der Umgebung des  $\Gamma$ -Punktes wird mit Hilfe der drei Luttingerparameter  $\gamma_i$  und den Parametern  $\eta_i$ , in Gl. (2.10) wiedergegeben [11, 12]. Neben den kinetischen Energien Gl. (2.9) und Gl.(2.10) werden noch die Wechselwirkungen benötigt. Die elektrostatische Wechselwirkung zwischen Elektron und Loch wird über das Coulomb-Potential,

$$V(\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e|} \quad (2.14)$$

ausgedrückt. Die Austauschwechselwirkung  $H_{\text{exch}}$  und die Central-Cell-Korrektur  $H_C$  sind durch [13]

$$H_{\text{exch}} + H_C = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left[ \frac{1}{2\epsilon_1^*} (e^{-r/\rho_{h1}} + e^{-r/\rho_{e1}}) + \frac{1}{2\epsilon_2^*} (e^{-r/\rho_{h2}} + e^{-r/\rho_{e2}}) \right] + \left[ -V_0 + J_0 \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{S}_e \mathbf{S}_h \right) \right] V_{\text{uc}} \delta(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

gegeben. Dabei ist der erste Term das Haken-Potential, welches die Wechselwirkung zwischen Exzitonen und Phononen beschreibt. Des Weiteren ist  $V_{\text{uc}}$ , das Volumen der Einheitszelle. Für die Dielektrizitätskonstanten gilt [13]

$$\frac{1}{\epsilon^*} = \frac{1}{\epsilon_b} + \frac{1}{\epsilon_s} \quad (2.16)$$

und für die Radien gilt [13]

$$\rho_{ei} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_e\omega_{\text{LO}i}}}, \quad \rho_{hi} = \sqrt{\frac{\hbar\gamma_1}{2m_h\omega_{\text{LO}i}}}. \quad (2.17)$$

Zusammenfassend lautet der Hamiltonian ohne äußere Felder

$$H = E_g + H_e(\mathbf{p}_e) + H_h(\mathbf{p}_h) + V(\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e) + H_{\text{exch}} + H_C, \quad (2.18)$$

mit der Bandlücke  $E_g$ . Die Werte der Parameter sind in Tabelle 2.1 aufgelistet.

## 2.2.2 Elektrisches und magnetisches Feld

Um die Wirkung eines externen elektrischen Feldes auf das Exziton beschreiben zu können, muss der Hamiltonian Gl. (2.18) um den Term

$$H_F(\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e) = -e(\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e) \cdot \mathbf{F} \quad (2.19)$$

ergänzt werden. Dabei ist  $\mathbf{F}$  die elektrische Feldstärke. Neben diesem Feld soll noch ein externes magnetisches Feld  $\mathbf{B}$  auf das Exziton wirken. Dieses lässt sich über das Vektorpotential  $\mathbf{A} = (\mathbf{B} \times \mathbf{r})/2$  einführen. Die Energie des Loch-, Elektron- und Quasispins im magnetischen Feld wird mit Hilfe von [12]

$$H_B = \mu_B [g_c \mathbf{S}_e + (3\kappa + g_s/2) \mathbf{I} - g_s \mathbf{S}_h] \cdot \mathbf{B} / \hbar \quad (2.20)$$

berechnet. Dabei ist  $\kappa$  der vierte Luttinger Parameter,  $g_c$ ,  $g_s$  sind die g-Faktoren des Elektronen- bzw. Lochspins und  $\mu_B$  das Bohrsche Magneton.

### 2.2.3 Gesamter Hamitonian

Der Hamiltonian zum Beschreiben von Kupferoxydplexzitonen in magnetischen und elektrischen Feldern setzt sich aus den Gleichungen (2.18), (2.19) und (2.20) zusammen. Durch Einführen von Schwerpunkts- und Relativkoordinaten, Gl. (2.3) sowie durch Nullsetzen des Schwerpunktsimpulses und der Schwerpunktkoordinaten ergibt sich der Hamiltonian der Relativbewegungen,

$$H = E_g + H_e(\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})) + H_h(-\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})) + V(\mathbf{r}) + H_{\text{exch}} + H_C + H_B + H_F(\mathbf{r}), \quad (2.21)$$

dieser lässt sich wiederum zu

$$H = H_0 + (eB)H_1 + (eB)^2H_2 + H_{\text{exch}} + H_C + H_F \quad (2.22)$$

umschreiben. Die einzelnen Terme werden durch irreduzible Tensoren ausgedrückt und lauten für ein elektrisches und magnetisches Feld in [001]-Richtung [12]:

$$\begin{aligned} H_0 = & E_g - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} + \frac{2}{3}\Delta \left( 1 + \frac{1}{\hbar^2} I^{(1)} \cdot S_h^{(1)} \right) + \frac{\gamma'_1}{2\hbar^2 m_0} \left( \hbar^2 p^2 - \frac{\mu'}{3} (P^{(2)} \cdot I^{(2)}) \right) \\ & + \frac{\gamma'_1 \delta'}{6\hbar^2 m_0} \left( \sum_{k=\pm 4} [P^{(2)} \times I^{(2)}]_k^{(4)} + \frac{\sqrt{70}}{5} [P^{(2)} \times I^{(2)}]_0^{(4)} \right) \\ & + \frac{3\eta_1}{\hbar^2 m_0} \left( \frac{1}{3} p^2 (I^{(1)} \cdot S_h^{(1)}) - \frac{\nu}{3} (P^{(2)} \cdot D^{(2)}) \right) \\ & + \frac{\eta_1 \tau}{\hbar^2 m_0} \left( \sum_{k=\pm 4} [P^{(2)} \times D^{(2)}]_k^{(4)} + \frac{\sqrt{70}}{5} [P^{(2)} \times D^{(2)}]_0^{(4)} \right), \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} H_1 = & \frac{1}{m_e} L_0^{(1)} + \frac{\mu_B}{e\hbar} \left( g_c S_{e0}^{(1)} - g_s S_{h0}^{(1)} + \left( 3\kappa + \frac{1}{2} g_s \right) I_0^{(1)} \right) + \frac{\gamma'_1}{2\hbar^2 m_0} \left( -\hbar^2 L_0^{(1)} \right) \\ & + \frac{\gamma'_1 \delta'}{6\hbar^2 m_0} \left( [M^{(2)} \times I^{(2)}]_{-4}^{(4)} - [M^{(2)} \times I^{(2)}]_4^{(4)} \right) \\ & + \frac{\gamma'_1 \delta'}{2\hbar^2 m_0} \sqrt{\frac{2}{5}} \left( [L^{(1)} \times I^{(2)}]_0^{(3)} - \frac{1}{3} [M^{(2)} \times I^{(2)}]_0^{(3)} \right) \\ & + \frac{\gamma'_1 \nu'}{2\hbar^2 m_0} \sqrt{\frac{5}{12}} \left( [L^{(1)} \times I^{(2)}]_0^{(1)} - \sqrt{\frac{2}{3}} [M^{(2)} \times I^{(2)}]_0^{(1)} \right) \\ & + \frac{3\eta_1}{\hbar^2 m_0} \left( -\frac{1}{3} L_0^{(1)} (I^{(1)} \cdot S_h^{(1)}) + \frac{\tau}{3} \left( [M^{(2)} \times D^{(2)}]_{-4}^{(4)} - [M^{(2)} \times D^{(2)}]_4^{(4)} \right) \right) \\ & + \frac{3\eta_1 \tau}{\hbar^2 m_0} \sqrt{\frac{2}{5}} \left( [L^{(1)} \times D^{(2)}]_0^{(3)} - \frac{1}{3} [M^{(2)} \times D^{(2)}]_0^{(3)} \right) \\ & + \frac{3\eta_1 \nu}{\hbar^2 m_0} \sqrt{\frac{5}{12}} \left( [L^{(1)} \times D^{(2)}]_0^{(1)} - \sqrt{\frac{2}{3}} [M^{(2)} \times D^{(2)}]_0^{(1)} \right), \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned}
 H_2 = & \frac{\gamma'_1}{24\hbar^2 m_0} \left\{ \hbar^2 \left( 2r^2 - \sqrt{\frac{2}{3}} X_0^{(2)} \right) - \delta' \left( \sum_{k=\pm 4} [X^{(2)} \times I^{(2)}]_k^{(4)} - \frac{2}{\sqrt{70}} [X^{(2)} \times I^{(2)}]_0^{(4)} \right) \right\} \\
 & + \frac{\gamma'_1}{24\hbar^2 m_0} \frac{\sqrt{14}}{3} \left( \mu' - \frac{12}{35} \delta' \right) [X^{(2)} \times I^{(2)}]_0^{(2)} \\
 & + \frac{\gamma'_1}{24\hbar^2 m_0} \left[ \frac{\mu'}{3} (X^{(2)} \cdot I^{(2)}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \left( \mu' - \frac{6}{5} \delta' \right) r^2 I_0^{(2)} \right] \\
 & + \frac{\eta_1}{12\hbar^2 m_0} \left( 2r^2 - \sqrt{\frac{2}{3}} X_0^{(2)} \right) (I^{(1)} \cdot S_h^{(1)}) \\
 & - \frac{\eta_1 \tau}{4\hbar^2 m_0} \left( \sum_{k=\pm 4} [X^{(2)} \times D^{(2)}]_k^{(4)} - \frac{2}{\sqrt{70}} [X^{(2)} \times D^{(2)}]_0^{(4)} \right) \\
 & + \frac{\eta_1}{4\hbar^2 m_0} \frac{\sqrt{14}}{3} \left( \nu' - \frac{12}{35} \tau \right) [X^{(2)} \times I^{(2)}]_0^{(2)} \\
 & + \frac{\eta_1}{4\hbar^2 m_0} \left[ \frac{\nu}{3} (X^{(2)} \cdot D^{(2)}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \left( \nu - \frac{6}{5} \tau \right) r^2 D_0^{(2)} \right], \tag{2.25}
 \end{aligned}$$

mit den Tensoren erster und zweiter Stufe [12]

$$I_{mn} = 3 \{I_m, I_n\} - \delta_{mn} \mathbf{I}^2, \tag{2.26}$$

$$P_{mn} = 3 \{p_m, p_n\} - \delta_{mn} p^2, \tag{2.27}$$

$$-iM_{mn} = 3 \{r_m, p_n\} - \delta_{mn} \mathbf{r} \mathbf{p}, \tag{2.28}$$

$$X_{mn} = 3 \{r_m, r_n\} - \delta_{mn} r^2, \tag{2.29}$$

sowie der Abkürzung[12]

$$D_k^{(2)} = [I^{(1)} \times S_h^{(1)}]_k^{(2)}. \tag{2.30}$$

Für die Parameter  $\gamma'_1$ ,  $\mu'$ ,  $\delta'$ ,  $\nu$  und  $\tau$  gelten folgende Gleichungen[12]:

$$\gamma'_1 = \gamma_1 + \frac{m_0}{m_e}, \quad \mu' = \frac{6\gamma_3 + 4\gamma_2}{5\gamma'_1}, \quad \delta' = \frac{\gamma_3 - \gamma_2}{\gamma'_1}, \quad \nu = \frac{6\eta_3 + 4\eta_2}{5\eta_1}, \quad \tau = \frac{\eta_3 - \eta_2}{\eta_1}. \tag{2.31}$$

Die benötigten Materialparameter (Luttinger Parameter, Massen usw.) sind in Tabelle 2.1 aufgelistet. Letztendlich wird mit Hilfe der irreduziblen Tensoren die Matrixdarstellung der Schrödingergleichung berechnet.

Tabelle 2.1: Materialparameter für die Berechnungen [4, 11, 12]

Energie der Bandlücke	$E_g = 2,17208 \text{ eV}$
Gitterkonstante	$a = 4,26 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
effektive Elektronenmasse	$m_e^* = 0,99m_e$
Dielektrizitätskonstanten	$\epsilon = \epsilon_{s1} = 7,5$
	$\epsilon_{b1} = \epsilon_{s2} = 7,115$
	$\epsilon_{b2} = 6,46$
Spin-Bahn-Kopplung	$\Delta = 0,131 \text{ eV}$
Energie der Phononen	$\hbar\omega_{LO1} = 18,7 \text{ meV}$
	$\hbar\omega_{LO2} = 87 \text{ meV}$
Valenzbandparameter	$\gamma'_1 = 2,77$
	$\kappa = 0,5$
	$\mu' = 0,0586$
	$\delta' = -0,404$
	$\eta_1 = -0,02$
	$\nu = 2,167$
	$\tau = 1,5$
Austausch Wechselwirkung	$J_0 = 0,792 \text{ eV}$
Central-Cell-Korrektur	$V_0 = 0,539 \text{ eV}$
g-Faktor Elektron	$g_c = 2,1$
g-Faktor Loch	$g_s = 2,0023$

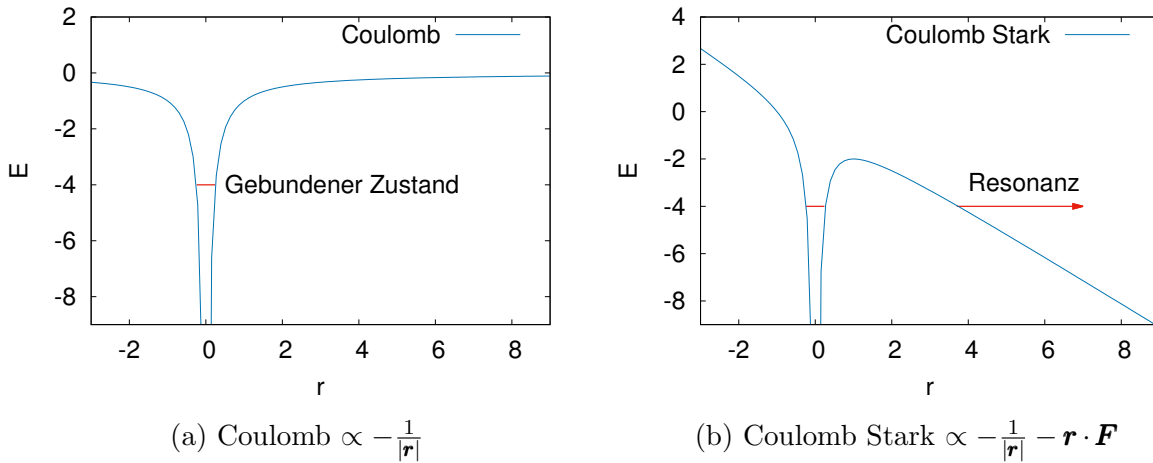


Abbildung 2.2: (a): Coulomb-Potential mit gebundenem Zustand. (b): Durch das elektrische Feld wird die Potentialbarriere erniedrigt, wodurch das Elektron mit einer Wahrscheinlichkeit durch diese tunneln kann. Der ehemals stabile Zustand ist nun eine Resonanz.

## 2.3 Resonanzen und komplexe Koordinatenrotation

### 2.3.1 Resonanzen

Resonanzen beschreiben einen temporären quasigebundenen Zustand eines quantenmechanischen Systems. In einem solchen Zustand befinden sich zum Beispiel instabile (radioaktive) Atomkerne. Sie zerfallen nach einer bestimmten Zeit in zwei Untersysteme, dem neuen Atomkern und dem ausgesandten Strahlungsteilchen. Allgemeiner ausgedrückt: Resonanzen sind langlebige Zustände mit genügend Energie, welche in zwei oder mehrere Untersysteme zerfallen [6]. Im Falle von Exzitonen können Resonanzen durch Anlegen eines elektrischen Feldes erzeugt werden. Dazu muss dem Hamiltonian Gl.(2.5) der Term  $-\mathbf{e}\mathbf{r} \cdot \mathbf{F}$  hinzugefügt werden [3]. Dieser beschreibt die Wechselwirkung zwischen dem Exziton (Elektron-Loch Paar) und dem elektrischen Feld  $\mathbf{F}$ . Die gesamte Wechselwirkung wird über das Coulomb-Stark-Potential,

$$V_{\text{CS}}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\mathbf{r}|} - \mathbf{e}\mathbf{r} \cdot \mathbf{F} \quad (2.32)$$

beschrieben. Durch das Anlegen eines elektrischen Feldes wird die Potentialbarriere des Coulomb-Potentials herabgesenkt (Abb. 2.2b), wodurch es nun dem Elektron möglich ist durch diese zu tunneln und in einen ungebundenen Zustand überzugehen. Das heißt, der ehemals stabile Zustand im Coulomb-Potential (Abb. 2.2a) ist nun ein quasistabiler Zustand mit begrenzter Lebensdauer. Eine einfache Methode, Resonanzen zu beschreiben,

ist über die gewohnte Zeitentwicklung eines stationären Zustandes [5],

$$\Psi_{\text{R}}(t) = e^{-i\frac{E_{\text{R}}t}{\hbar}} \Psi_{\text{R}}(0). \quad (2.33)$$

Um einen zerfallenden Zustand zu erhalten, muss die Energie  $E_{\text{R}}$  komplex sein:

$$E_{\text{R}} = E_{\text{res}} - i\frac{\Gamma}{2}, \quad (2.34)$$

wobei  $E_{\text{res}}$ ,  $\Gamma$  reell sind und  $\Gamma \geq 0$  ist. Da die Energien nicht mehr reell sind sondern komplex, können diese keine Eigenwerte eines hermiteschen Hamiltonian sein. Die Operatoren sind deshalb nicht-hermitesche.

### 2.3.2 Komplexe Koordinatenrotation

Um Resonanzen berechnen zu können muss der Hamiltonoperator nicht-hermitesch sein. Das wird mit Hilfe der komplexen Koordinatenrotation erreicht. Ein zugängliches Beispiel ist, wie in [5] der Hamiltonian des Wasserstoffatoms für die s-Zustände

$$H(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{1}{r}, \quad (2.35)$$

wobei  $r$  der radialen Koordinate in Kugelkoordinaten entspricht. Der Erwartungswert der Energie ist für die s-Wellenfunktion  $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)/\sqrt{4\pi}$  gegeben durch

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty R(r) \left[ -\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{1}{r} \right] R(r) r^2 dr}{\int_0^\infty R^2(r) r^2 dr}. \quad (2.36)$$

Dabei ist  $R(r)$  eine reelle Funktion und der Integrationsweg ist entlang der reellen Achse. Ist  $R(r)$  zusätzlich noch eine analytische Funktion kann das Integral, Gl. (2.36) nach dem Cauchy'schen Integralsatz in ein komplexes Wegintegral

$$\langle E \rangle = \frac{\int_C R(z) \left[ -\frac{1}{2} \frac{1}{z^2} \frac{d}{dz} z^2 \frac{d}{dz} - \frac{1}{z} \right] R(z) z^2 dz}{\int_C R^2(z) z^2 dz} \quad (2.37)$$

umgeschrieben werden. Wählt man für  $R(r) = 2e^{-r}$  und  $z = re^{i\theta}$ , wobei  $\theta$  der Winkel zwischen Real- und Imaginärteil ist, dann ergibt sich [5]

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty e^{-re^{i\theta}} \left[ -\frac{e^{-i2\theta}}{2} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{e^{-i\theta}}{r} \right] e^{re^{i\theta}} (e^{i\theta} r)^2 e^{i\theta} dr}{\int_0^\infty (e^{-re^{i\theta}})^2 (e^{i\theta} r)^2 e^{i\theta} dr} = -\frac{1}{2}, \quad (2.38)$$

was auch die Lösung von Gl. (2.36) ist. Ferner gilt, dass die Energieeigenwerte der gebundenen Zustände invariant unter der komplexen Koordinatenrotation sind. Der Grund dafür ist der Cauchy'sche Integralsatz. Nach diesem ergeben sich, für verschiedene Integrationswege  $C_i$ , welche aber immer die selben zwei Punkte miteinander verbinden



die selben Lösungen, wenn die zu integrierende Funktion zwischen diesen holomorph ist. Wellenfunktionen gebundener Zustände verschwinden für  $r \rightarrow \infty$  und liefern somit im Unendlichen keinen Beitrag zum Linienintegral. Dadurch müssen die Integrationswege  $C_i$  im Unendlichen nicht auf denselben Punkt laufen. Verdeutlichen lässt sich dies an den beiden Integralen, Gl. (2.36) und Gl. (2.38). Dabei wurde einmal entlang der reellen Achse integriert (Gl. (2.36)) und einmal entlang einer um den Winkel  $\theta$  in die komplexe Ebene gedrehte Achse (Gl. (2.38)). Beide liefern, wie bereits erwähnt, den selben Wert, obwohl beide Wege im Unendlichen auf unterschiedliche Punkte laufen.

Damit die gebundenen Energieeigenwerte invariant unter der komplexen Koordinatenrotation bleiben, müssen folgende Punkte beachtet werden [5]:

- Die Ortsvariable  $r$  darf keine Observable sein.
- Die auftretenden Operatoren müssen entsprechend komplex rotiert (skaliert) werden.
- Die durch die Einführung der komplexen Rotation auftretenden Terme ( $e^{i\theta}$ ) werden bei der komplexen Konjugation nicht mit konjugiert, z.B.  $\Psi(re^{i\theta}, \phi, \theta) \rightarrow \Psi^*(re^{i\theta}, \phi, \theta)$ .

Im Gegensatz zu den gebundenen Zuständen ändern sich die Streu, bzw. Kontinuumszustände unter der komplexen Koordinatenrotation. Verdeutlichen lässt sich das anhand der Lösung eines radialen Streuproblems [14],

$$\Psi_{scatt} = A(k) \frac{e^{ikr}}{r} + B(k) \frac{e^{-ikr}}{r} \quad (2.39)$$

mit der Energie ( $m = 1, \hbar = 1$ ),

$$E = \frac{k^2}{2} \quad (2.40)$$

für  $r \rightarrow \infty$ . Wird die Wellenfunktion Gl. (2.39), über  $r \rightarrow re^{i\theta}$  in die komplexe Ebene rotiert, divergiert sie, was ein unphysikalisches Ergebnis ist. Um eine divergierende Wellenfunktion zu verhindern, muss der Wellenvektor auch komplex sein [6],  $k \rightarrow ke^{-i\theta}$ . Die Energieeigenwerte,

$$E = \frac{k^2 e^{-2i\theta}}{2}, \quad (2.41)$$

sind um den Winkel  $-2\theta$  in die untere komplexe Ebene gedreht worden. Wie zu Beginn dieses Kapitels erwähnt, lassen sich mit Hilfe der komplexen Koordinatenrotation Resonanzen berechnen. Sie treten als neue, von dem Drehwinkel unabhängige komplexe Eigenenergien im Spektrum auf. Abbildung 2.3a zeigt das Spektrum eines ungedrehten Hamiltonians, wobei die Resonanzen nicht sichtbar sind. Abbildung 2.3b zeigt hingegen das Spektrum eines rotierten Hamiltonian, mit aufgedeckten Resonanzen. Anhand des

invertieren harmonischen Oszillators lassen sich leicht verständlich Resonanzen berechnen [6]. Der Hamiltonoperator ist durch

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2} x^2 \quad (2.42)$$

gegeben. Die Lösungen der entsprechenden Schrödingergleichung sind ungebundene Zustände, d.h. es gibt keine quadratintegrablen Wellenfunktionen. Wird der Hamiltonoperator Gl. (2.42), komplex rotiert

$$H_r = -\frac{1}{2} e^{-2i\theta} \frac{d^2}{dx^2} - e^{2i\theta} \frac{1}{2} x^2 \quad (2.43)$$

sind die komplex rotierten und quadratintegrablen Wellenfunktionen,

$$\Psi_n(xe^{i\theta}) = c H_n \left( \frac{x}{\sqrt{i}} e^{i\theta} \right) \exp \left( i e^{2i\theta} \frac{x^2}{2} \right) \quad (2.44)$$

die Lösungen der Schrödingergleichung. Dabei ist  $c$  die Normierungskonstante und  $H_n(x)$  die Hermitpolynome. Des Weiteren lauten die rein imaginären Energieeigenwerte

$$E_n = -i \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.45)$$

Der invertierte harmonische Oszillator besitzt somit unendlich viele Resonanzen mit unterschiedlich langen Lebensdauern ( $\Gamma = 2n + 1$ ). Die komplexe Koordinatenrotation hat folgende Einflüsse auf das Energiespektrum:

- Gebundene Zustände, welche reellen Energiewerten entsprechen, bleiben unverändert.
- Die Energiewerte der gestreuten bzw. Kontinuumszustände werden um  $-2\theta$  in die komplexe Ebene gedreht (Abb. 2.3b).
- Ist der Winkel  $\theta$  groß genug, werden Resonanzen in der komplexen Ebene aufgedeckt (Abb. 2.3b). Ferner gilt für bereits aufgedeckte Resonanzen, dass ihre Lage nicht mehr von dem Rotationswinkel  $\theta$  abhängt.

## 2.4 Basis

Um eine geeignete Basis zu finden, werden die verschiedenen Drehimpulse und ihre Kopplungen betrachtet. Durch die Spin-Bahn-Kopplung ergibt sich der effektive Loch-Spin  $J = I + S_h$  und durch den kubischen Teil in Gl. (2.21) ergibt sich der effektive Drehimpuls  $F = L + J$ , dabei ist  $L$  der Bahndrehimpuls des Exzitons [12]. Mit dem Spin

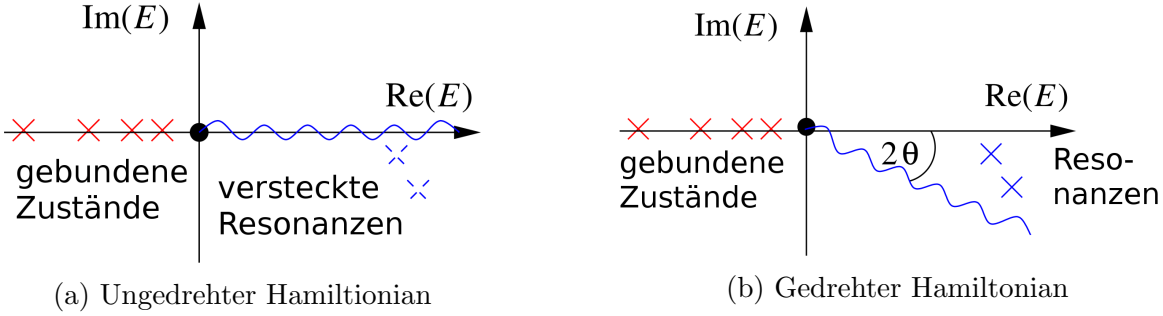


Abbildung 2.3: (a): Ohne komplexe Koordinatenrotation sind die Resonanzen nicht sichtbar. (b): Durch die Rotation aufgedeckte Resonanzen. Jeweils bearbeitet aus [14].

des Elektrons erhält man den Gesamtdrehimpuls  $F_t = F + S_e$  und seiner  $z$ -Komponente  $M_{F_t}$  [11]. Als Ansatz für den Radialteil der Wellenfunktion werden die Coulomb-Sturm-Funktionen [11, 12],

$$U_{NL}(\rho) = N_{NL}(2\rho)^L e^{-\rho} L_N^{2L+1}(2\rho), \quad (2.46)$$

mit den Laguerre-Polynomen  $L_N^{2L+1}$ , dem Normierungsfaktor  $N_{NL}$  und  $\rho = \frac{r}{\alpha}$ , mit  $\alpha = na_{\text{exz}}$  benutzt. Des Weiteren ist die radiale Quantenzahl  $N$  über  $n = N + L + 1$  mit der Hauptquantenzahl  $n$  verknüpft. Als Ansatz für die Wellenfunktion gilt somit [11, 12]

$$|\Pi\rangle = |N, L; (I, S_h), J; F, S_e; F_t, M_{F_t}\rangle, \quad (2.47)$$

$$|\Psi\rangle = \sum_{NLJF_tM_{F_t}} c_{NLJF_tM_{F_t}} |\Pi\rangle, \quad (2.48)$$

mit den Koeffizienten  $c$ . Um die komplexe Koordinatenrotation verwenden zu können wird  $r$  mit  $\rho|\alpha|e^{i\theta}$  ersetzt und die Schrödingergleichung  $H\Psi = E\Psi$  mit  $|\alpha|^2 e^{2i\theta}$  multipliziert. Die entstehende Schrödingergleichung lässt sich in die Matrixschreibweise umschreiben, deren Elemente sind in [4] zu finden. Das entsprechende generalisierte Eigenwertproblem

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{E}\mathbf{M}\mathbf{c} \quad (2.49)$$

lässt sich mit einer geeigneten LAPACK Routine lösen. Details zu dem Programm werden in Kapitel 3 erläutert. Da die Basis nur endlich lang sein kann, werden die Quatenzahlen für jeden Wert von  $n = N + L + 1$  wie folgt gewählt [11, 12]:

$$\begin{aligned} L &= 0, \dots, n-1, \\ J &= 1/2, 3/2, \\ F &= |L - J|, \dots, \min(L + J, F_{\max}), \\ F_t &= F - 1/2, F + 1/2, \\ M_{F_t} &= -F_t, \dots, F_t. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Damit die Eigenwerte konvergieren werden die Quantenzahlen  $n$  und  $F_{\max}$  groß genug gewählt. Das elektrische und magnetische Feld wird entlang der [001] Symmetrieachse des Kupferoxydulkristalls ausgerichtet. Damit die Quantisierungsachse mit der Orientierung der Felder übereinstimmen, werden die Koordinaten des Hamiltonians Gl.(2.21) entsprechend gedreht.

## 2.5 Relative Oszillatorstärke

Die Oszillatorstärke gibt an, wie stark zwei quantenmechanische Zustände miteinander koppeln, das heißt wie stark der exzitoniche Zustand mit dem eingestrahlt Licht koppelt. Im Falle von Kupferoxydul ist der Übergang von Grund- in den Exzitonenzustand paritätsverboten, weswegen das Übergangsmatrixelement proportional zum Gradienten der Einhüllenden bei  $r = 0$  [11, 12] ist. Des Weiteren muss der exzitoniche Zustand die Drehimpulsquantenzahl  $L = 1$  besitzen und der Gesamtspin  $S = S_e + S_h = 0$  des Elektrons und Lochs darf sich nicht ändern [11, 12]. Die relative Oszillatorstärke für linear polarisiertes Licht in  $x, y, z$  ist durch [12]

$$f_{\text{rel}} \sim \left| \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} \langle \pi_{x,y,z} | \Psi(\mathbf{r}) \rangle \right|^2 \quad (2.51)$$

mit

$$|\pi_x\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|2, -1\rangle_D + |2, 1\rangle_D), \quad (2.52)$$

$$|\pi_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|2, -1\rangle_D + |2, 1\rangle_D), \quad (2.53)$$

$$|\pi_z\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|2, -2\rangle_D + |2, 2\rangle_D) \quad (2.54)$$

gegeben. Die Kurzschreibweise  $|F_t, M_{F_t}\rangle$  steht für

$$|(S_e, S_h)I; I + S, L; F_t, M_{F_t}\rangle = |(1/2, 1/2)0, 1; 1, 1; F_t, M_{F_t}\rangle. \quad (2.55)$$

Für ein Magnetfeld oder ein elektrisches Feld in [001]-Richtung, kann durch gruppentheoretische Rechnungen die Linearkombinationen der Gleichungen (2.56)-(2.58) gefunden werden. Sie lauten [12]

$$|\pi_z\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|2, -2\rangle_D + |2, 2\rangle_D), \quad (2.56)$$

$$|\sigma_z^+\rangle = \frac{-i}{\sqrt{2}} (|\pi_x\rangle_D + i|\pi_y\rangle_D) = |2, -1\rangle_D, \quad (2.57)$$

$$|\sigma_z^-\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|\pi_x\rangle_D - i|\pi_y\rangle_D) = -|2, 1\rangle_D. \quad (2.58)$$

Hierbei ist  $|\pi_z\rangle$  linear polarisiertes Licht in  $z$ -Richtung,  $|\sigma_z^+\rangle$  und  $|\sigma_z^-\rangle$  sind zirkular polarisiertes Licht. Die relative Oszillatorstärke für das linear polarisierte Licht wird über

$$f_{\text{rel}} \sim \left| \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} \langle \pi_z | \Psi(\mathbf{r}) \rangle \right|^2 \quad (2.59)$$

und für zirkular polarisiertes Licht über

$$f_{\text{rel}} \sim \left| \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} \langle \sigma_z^\pm | \Psi(\mathbf{r}) \rangle \right|^2 \quad (2.60)$$

bestimmt. Ferner lassen sich mit Hilfe der Oszillatorstärken die Spektren bestimmen. Als Grundlage dient die Berechnung des Wirkungsquerschnitts der Photoionisation von Rescigno und McKoy [15]. Dabei wurde der Querschnitt mit Hilfe der komplexen Koordinatenrotation berechnet. Er lautet [15]:

$$\sigma(E) = 4\pi\alpha(E - E_0) \text{Im} \left( \sum_j \frac{\langle \Psi_0 | D | \Psi_j(\theta) \rangle^2}{E_j - E} \right), \quad (2.61)$$

mit  $\alpha$  der Feinstrukturkonstanten,  $E_0$  die Energie des stationären Zustandes  $\Psi_0$ ,  $E_j$  die komplexen Energien der ionisierten Zustände  $\Psi_j(\theta)$  und  $D$  der Dipoloperator. In unserem Fall entspricht der Term  $\langle \Psi_0 | D | \Psi_j(\theta) \rangle$  der relativen Oszillatorstärke  $f_{\text{rel}}$ , wobei nicht der Betrag gebildet wird, sondern nur quadriert wird,

$$f_{\text{rel}}^{(j)} \sim \left( \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} \langle \sigma_z^\pm | \Psi_j(\mathbf{r}) \rangle \right)^2. \quad (2.62)$$

Das Spektrum ist durch

$$f(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left( \sum_j \frac{f_{\text{rel}}^{(j)}}{E - E_j} \right) \quad (2.63)$$

gegeben. Dabei sind  $E_j$  die komplexen Energien der Resonanzen.



# 3 Programmaufbau und Bestimmung der Resonanzen

## 3.1 Programmaufbau

Um das generalisierte Eigenwertproblem (Gl. (2.49)) lösen zu können, wurde ein Fortranprogramm geschrieben. Als Grundlage diente das Programm von Dr. Schweiner mit dem er unter anderem den Einfluß der Valenzbandstruktur von Kupferoxydul auf das Exzitonenspektrum [11] untersuchte, sowie eine Theorie zu Exzitononen in Kupferoxydul in externen magnetischen Feldern entwickelte [12]. Seine gesamten Ergebnisse können in Ref. [4] nachgelesen werden.

Das Programm musste dahingehend erweitert werden, dass nun nicht-hermitesche Matrizen mit komplexen Eigenwerten gelöst werden können. Dazu wurde die LAPACK-Routine ZGGEV gewählt [16], mit dieser werden die Eigenwerte und Eigenvektoren bestimmt. Des Weiteren musste die komplexe Rotation implementiert werden. Um zu gewährleisten, dass die neue LAPACK-Routine richtige Ergebnisse liefert, wurde das Eigenwertproblem zunächst ohne komplexe Rotation gelöst und mit den Ergebnissen der alten Routine (hermitesche Matrizen) verglichen. Weichen die Resultate mehr als nur um einen numerischen Fehler voneinander ab, wurden die Parameter der neuen Routine angepasst. Sind die berechneten Energieeigenwerte der beiden Routinen gleich, wurde das Programm entsprechend der Punkte in Kapitel 2.4 um die komplexe Koordinatenrotation erweitert. Zum Überprüfen ob alle Matrixelemente richtig gedreht wurden, wurde das elektrische Feld vorerst auf Null gesetzt. Da die komplexe Rotation keinen Einfluß auf die gebundenen Zustände hat und das magnetische Feld die Potentialbarriere des Coulomb-Potentials nicht verringert, müssen die Energieeigenwerte für verschiedene Drehwinkel gleich bleiben.

Als nächstes wurde das magnetische Feld auf Null gesetzt und die elektrische Feldstärke klein gewählt, so dass die Potentialbarriere, welche durch das elektrische Feld verringert wird noch groß genug ist, um ein Tunneln zu verhindern, wodurch die Zustände noch gebunden sind. Erfüllt das Programm alle zuvor erwähnten Punkte, so kann nach Resonanzen gesucht werden. Ferner muss darauf geachtet werden, dass die Basis groß genug und der Drehwinkel nicht zu groß gewählt wird, da sonst nicht konvergente Zustände mit positiven Imaginärteil auftreten. Das Programm läuft folgendermaßen ab:

Als erstes wird anhand von  $n$  und  $F_{\max}$  die Dimension der Matrix und die Basis berechnet. Anschließend werden die Matrixelemente mit den Feldstärken und den Dreh-

winkeln bestimmt. In dieser Matrix ist der Term mit der  $\delta$ -Funktion von  $H_{\text{exch}} + H_C$  (Gl. (2.15)) nicht enthalten. Die Energieeigenwerte und Eigenvektoren werden mit der LAPACK-Routine ermittelt. Im Anschluß daran wird der noch fehlende Term über eine Störungsrechnung miteinbezogen. Diese führt erneut auf ein Eigenwertproblem der Form

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = E\mathbf{c}, \tag{3.1}$$

welches mit der LAPACK-Routine ZGEEV [16] gelöst wird. Die Routine wurde gewechselt um die Rechenzeit zu verringern und weil es einfacher ist die richtigen Werte zu bekommen, wenn man dem Eigenwertproblem entsprechend die LAPACK-Routine wählt. Zuletzt werden die relativen Oszillatorstärken berechnet.

Aufgrund der endlichen Basis entstehen numerische Ungenauigkeiten. Diese äußern sich durch das Auftreten von Energieeigenwerten mit positiven Imaginärteil, welche nicht konvertierten Eigenzuständen entsprechen. Um ihre Zahl möglichst gering zu halten, müssen die Quantenzahlen  $n$  und  $F_{\text{max}}$  groß genug gewählt werden. Darüber hinaus darf der Drehwinkel der komplexen Rotation nicht zu groß sein, da sonst wieder vermehrt unkonvergierte Eigenwerte auftreten. Es muss somit ein Kompromiss zwischen der Größe der Basis und des Drehwinkels gefunden werden. Eine große Basis führt zu einer hohen Rechenzeit und bei einem zu kleinen Drehwinkel können keine Resonanzen gefunden werden.



## 3.2 Bestimmung der Resonanzen

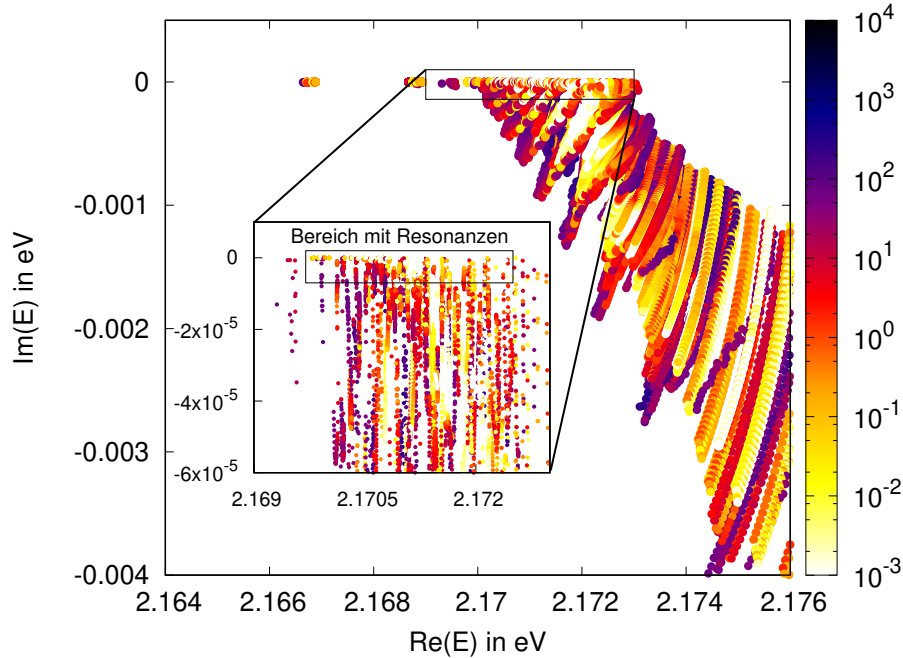


Abbildung 3.1: Rohdaten der komplexen Energieeigenwerte von Kuperoxydul in einem elektrischen Feld mit  $F = 7200 \text{ Vm}^{-1}$  in  $[001]$ -Richtung. Der Drehwinkel der komplexen Rotation lief von  $\theta = 0,1$  bis  $\theta = 0,3$ , mit 40 Zwischenschritten. Die Farbskala zeigt die relative Oszillatorstärke für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht an. Deutlich zu erkennen sind die gedrehten Kontinuumszustände. Die Vergrößerung zeigt den Bereich in dem Resonanzen gefunden wurden.

Beim Bestimmen der Resonanzen wurde zuerst die Eigenschaft ausgenutzt, dass die komplexe Rotation keinen Einfluß auf die gebundenen Zustände hat. Das heißt Energiewerte deren Imaginärteil numerisch Null ( $\sim 10^{-10}$ ) sind werden herausgefiltert. Zusätzlich werden die Energien der Kontinuumszustände, welche sich mit dem Drehwinkel bewegen, ignoriert. Ist der Winkel  $\theta$  groß genug, werden Resonanzen in der komplexen Ebene aufgedeckt. Mit steigendem Winkel werden mehr von ihnen sichtbar. Dabei ändert sich die Lage der bereits Aufgedeckten nicht mehr. Diese Tatsache lässt sich ausnutzen um Resonanzen zu finden. Abbildung 3.1 zeigt die Rohdaten für eine elektrische Feldstärke von  $F = 7200 \text{ Vm}^{-1}$  in  $[001]$ -Richtung. Der Drehwinkel lief von 0,1 bis 0,3 mit 40 Zwischenschritten. Die Farbe der Energiewerte gibt die relative Oszillatorstärke an. Besonders deutlich erkennt man die in die negative komplexe Ebene gedrehten Kontinuumszustände. Der vergrößerte Plot in Abbildung 3.1 zeigt den Bereich in dem sich Resonanzen befinden. Dieser Plot wurde erneut in Gebiete A bis D aufgeteilt (Abb. 3.2).

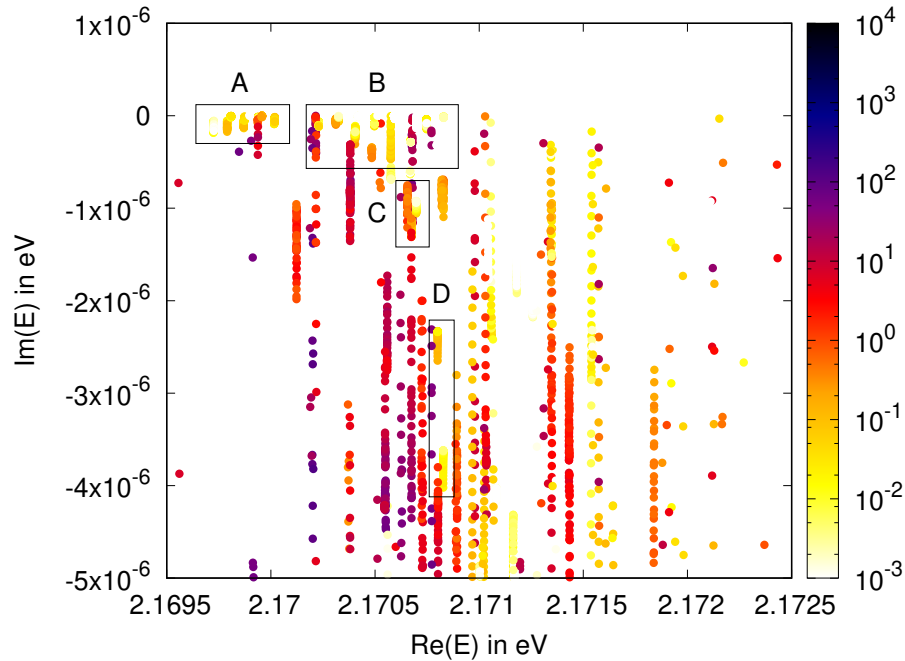


Abbildung 3.2: Bereiche mit Resonanzen mit  $\sigma^-$  pol. Licht.

In diesen wurden Resonanzen gefunden.

In Abbildung 3.3 sind zwei Beispiele für konvergente und zwei für divergierte Resonanzen abgebildet. Das elektrische Feld liegt entlang der  $[001]$ -Richtung mit einer Feldstärke von  $F = 28800 \text{ Vm}^{-1}$  an. Dabei entspricht jeder Punkt einem anderem Winkel. Das erste Beispiel zeigt einen Häufungspunkt (Abb. 3.3a). Hierbei taucht die Resonanz auf und bewegt sich zunächst mit steigendem Drehwinkel weiter in die negative komplexe Ebene bis sie schließlich in einem Punkt zur Ruhe kommt, obwohl sich der Winkel erhöht. Das bedeutet, dass sich seine Lage nicht mehr ändert. Im zweiten Beispiel (Abb. 3.3b) durchläuft die Resonanz eine Schleife, bei der auch ein Bereich mit vielen Punkten auftritt. Beim Durchsuchen der Spektren sind die meisten konvergierten Resonanzen vom Beispiel eins. Neben diesen finden sich auch nicht konvergente Resonanzen. Sie entstehen meist dadurch, dass der gewählte Winkel noch zu klein ist. Die Abbildungen 3.3c und 3.3d zeigen die Verläufe von nicht konvergenten Resonanzen. Dabei sieht Abbildung 3.3c für eine genügend große Achsenskalierung aus wie eine Resonanz, erst beim Vergrößern zeigt sich, dass es keine ist. Betrachtet man den Verlauf in Abbildung 3.3d, erkennt man weder eine Schleife noch einen Häufungspunkt. Es gibt noch weitere Verläufe, welche aber eindeutig keine Resonanzen sind.

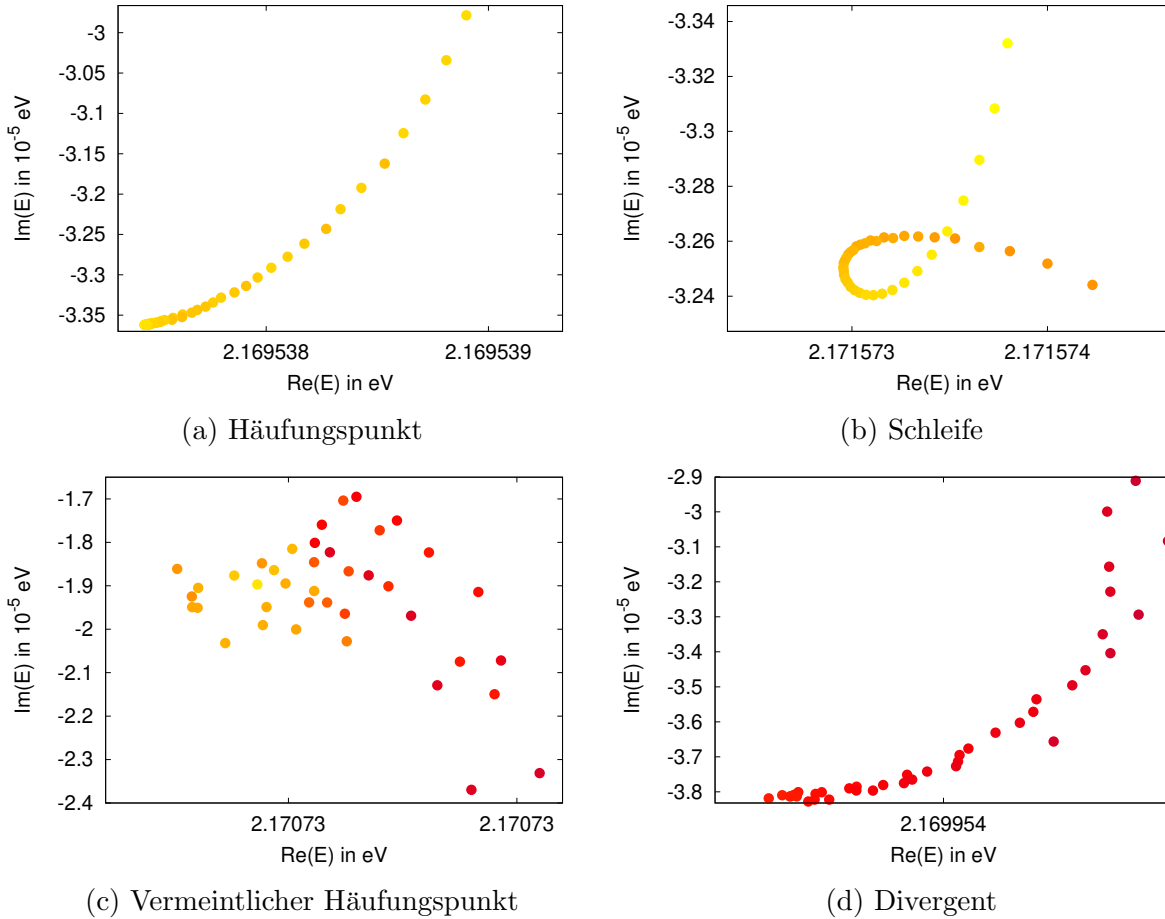


Abbildung 3.3: Beispiele für konvergierte und divergierte Resonanzen. Die elektrische Feldstärke betrug  $F = 28800 \text{ Vm}^{-1}$  (a): Die Resonanz taucht bei einem Drehwinkel auf und bewegt sich mit steigendem Winkel mit, bis sie schließlich in einem Punkt, trotz steigendem Winkel ruht. (b): Die Resonanz bewegt sich in einer Schleife. (c): Ist die Achsenskalierung groß genug sieht man einen Häufungspunkt, wird dieser aber vergrößert erkennt man keine Resonanz. (d): Keine Resonanz, da es keinen Häufungspunkt gibt.



# 4 Exzitonen in elektrischen und magnetischen Feldern

In diesem Kapitel wird das Verhalten von Exzitonen in Kupferoxydul bei angelegten elektrischen und magnetischen Feldern untersucht. Des Weiteren wird mit Hilfe der komplexen Koordinatenrotation nach Resonanzen gesucht, einmal mit einem elektrischen Feld in [001]-Richtung und einmal mit parallelen elektrischen und magnetischen Feldern, welche auch in [001]-Richtung ausgerichtet sind.

## 4.1 Exzitonen in elektrischem Feld in [001]-Richtung

Bei Anlegen eines elektrischen Feldes (ohne Magnetfeld) ist das Vektorpotential  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  und der  $H_B$  Term in Gl.(2.21) gleich Null, der Hamiltonian lautet

$$H = E_g + H_e(\mathbf{p}) + H_h(-\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) + H_{\text{exch}} + H_C + H_F(\mathbf{r}). \quad (4.1)$$

Nachdem das entsprechende Eigenwertproblem vom Typ Gl.(2.49) gelöst wurde, konnten die relativen Oszillatorstärken für zirkular polarisiertes Licht mit Hilfe der Gleichung (2.60) bestimmt werden. Um Resonanzen finden zu können, lief der Drehwinkel der komplexen Koordinatenrotation von  $\theta = 0,1$  bis  $\theta = 0,3$  mit 40 Zwischenschritten. Um möglichst viele konvergierte Eigenwerte zu bekommen wurden die Quantenzahlen  $n$  und  $F_{\text{max}}$  auf den Wert 22 und 15 gesetzt. Des Weiteren wurde das Spektrum mit der Gleichung (2.63) berechnet. Es wurde für vier verschiedene elektrische Feldstärken nach Resonanzen gesucht. Es zeigte sich, dass man für  $\sigma^+$  und für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht die selben Resonanzen mit den jeweils gleichen Oszillatorstärken erhält.

Für eine elektrische Feldstärke von  $F = 7200 \text{ Vm}^{-1}$  sind die Positionen der konvergierten Resonanzen in der komplexen Ebene in Abbildung 4.1 eingezeichnet. Der Imaginärteil hängt direkt mit der Lebensdauer der resonanten Zustände zusammen. Es zeigt sich, dass die Imaginärteile im Bereich von  $\sim -10^{-7} \text{ eV}$  bis  $\sim -10^{-5} \text{ eV}$  liegen, wobei die meisten einen von  $\sim -10^{-6} \text{ eV}$  besitzen. Es handelt sich somit um langlebige Zustände. Die Farbskala zeigt die relativen Oszillatorstärken an, je dunkler desto höher. Hier liegen sie im gelben bis orangenen Bereich, also von  $10^{-2}$  bis  $10^{-1}$ . Zusätzlich besitzt eine Resonanz eine relative Oszillatorstärke von ungefähr 2 (lilauer Bereich). Diese entspricht im Spektrum dem höchsten Peak (Abb. 4.1 oben). Daraus folgt, dass Resonanzen mit großem Imaginärteil (nah an der Null) und großer Oszillatorstärke zu hohen Peaks im Spektrum führen.

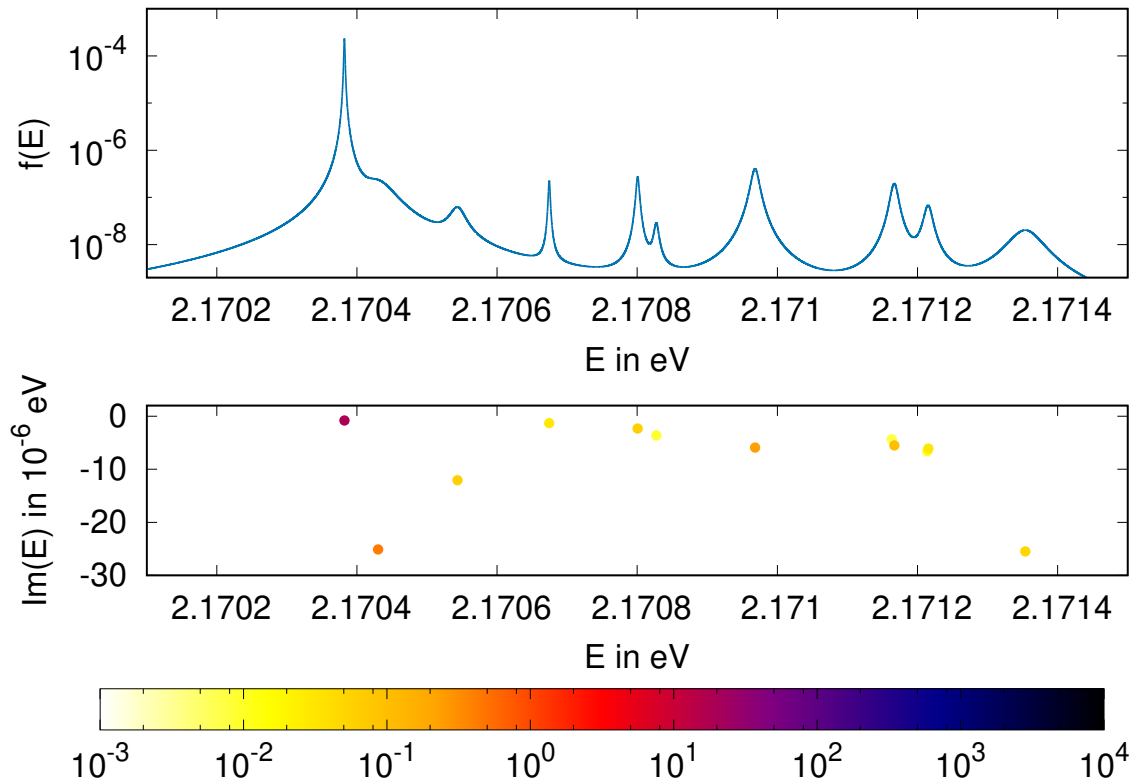


Abbildung 4.1: Der obere Plot zeigt das Spektrum, welches mit Hilfe der ermittelten Resonanzen bestimmt wurde. Die elektrische Feldstärke beträgt  $F = 7200 \text{ Vm}^{-1}$ . Der untere Plot zeigt die Position der Resonanzen in der komplexen Ebene. Ferner gibt die Farbe die relativen Oszillatorstärken wieder.

Obwohl zwölf Resonanzen gefunden wurden, weist das Spektrum nur zehn Maxima auf. Die Ursache hierfür ist, dass jeweils zwei Resonanzen sehr nah beieinander liegen und somit keine vier Peaks sichtbar sind sondern nur zwei. Durch Verdoppeln der elektrischen Feldstärke auf  $F = 14400 \text{ Vm}^{-1}$  erhöht sich die Anzahl der Resonanzen. Folglich werden mehr vormals stabile Zustände instabil. Der Grund hierfür ist, dass die Potentialbarriere des Coulomb-Potentials erniedrigt wird und es mehr Zuständen möglich ist zu tunneln. Abbildung 4.2 zeigt das Spektrum und die Lage der Resonanzen in der komplexen Ebene. Im Vergleich mit der vorherigen Feldstärke liegen die Resonanzen tiefer in der negativen komplexen Ebene, was bedeutet, dass die Zustände bei höherer Feldstärke eher tunneln als zuvor, d.h. ihre Lebensdauer ist geringer. Des Weiteren erkennt man, dass die Peaks der Resonanzen mit kleineren (negativeren) Imaginärteil und höheren relativen Oszillatorstärken breiter sind als Resonanzen mit größeren Imaginärteil und geringeren Oszillatorstärken. Anhand der Färbung der komplexen Energien, erkennt man, dass ihre

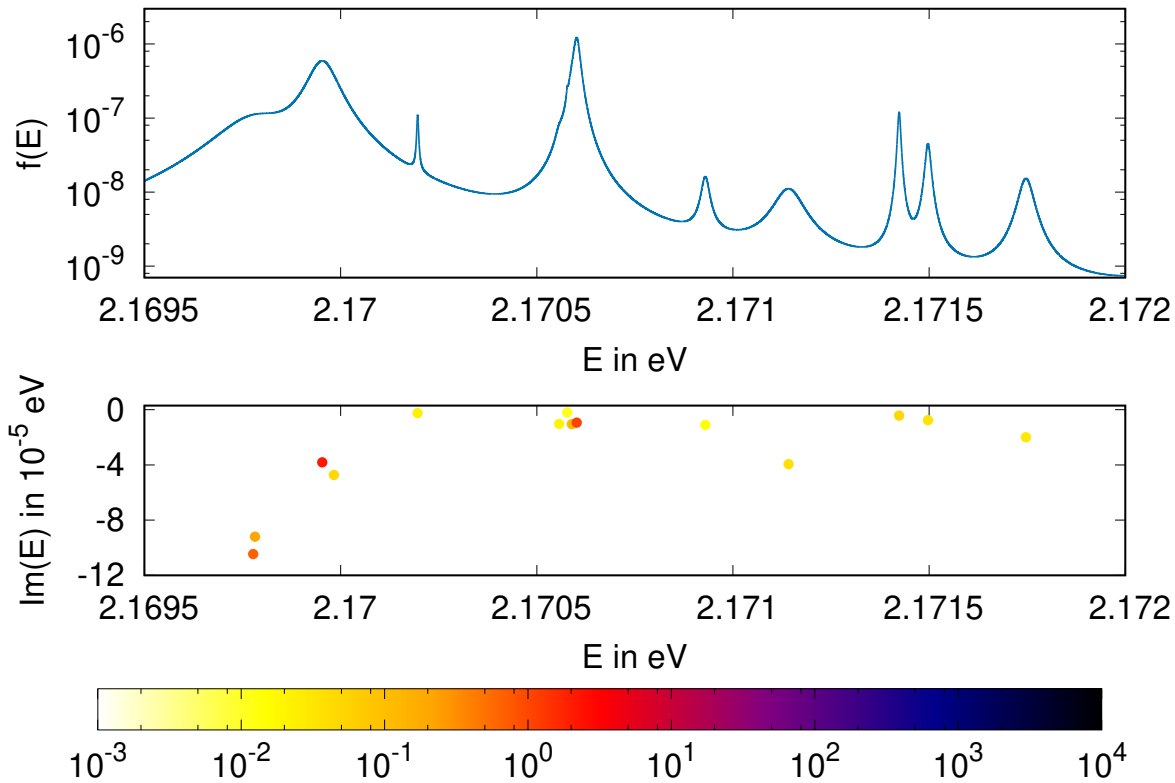


Abbildung 4.2: Spektrum, Lage und relative Oszillatorstärken der Resonanzen für eine elektrische Feldstärke von  $F = 14400 \text{ Vm}^{-1}$ .

relativen Oszillatorstärken im Bereich  $10^{-2}$  (gelb) bis etwas über  $10^0$  (rot) liegen. Sie steigen somit leicht mit der Feldstärke an. Durch Erhöhen der elektrischen Feldstärke auf  $F = 21600 \text{ Vm}^{-1}$  finden sich noch mehr Resonanzen. Das Spektrum (Abb. 4.3, oben) besitzt zwölf Maxima. Aufgrund ihrer Breite werden nicht alle gefundenen Resonanzen sichtbar. Zudem liegen viele Resonanzen nah beieinander. Die Lagen in der komplexen Ebene sind in Abbildung 4.3, unten eingezeichnet. Im Vergleich zur vorherigen Feldstärke liegen die Resonanzen erneut tiefer in der negativen imaginären Ebene. Des Weiteren sind die Oszillatorstärken auch höher, sie sind jetzt im Bereich  $10^{-2}$  (gelb) bis  $10^2$  (blau). Anhand der Breite der ersten zwei Peaks kann bestätigt werden, dass Resonanzen mit großer Oszillatorstärke und kleinem Imaginärteil zu breiten Peaks führen. Für die elektrische Feldstärke  $F = 28800 \text{ Vm}^{-1}$  findet man weniger Resonanzen. Der Grund dafür ist, dass der Drehwinkel der komplexen Koordinatenrotation zu klein ist um die jetzt noch kurzlebigeren Zustände aufzudecken. Diese befinden sich nämlich noch weiter im Negativen der komplexen Ebene. Anschaulich sieht man das anhand der Abbildung 4.4, in der die Position der komplexen Energien aufgezeichnet sind. Die Resonanzen befinden sich im Vergleich zu den anderen Feldstärken tiefer in der negativen Ebene. Das

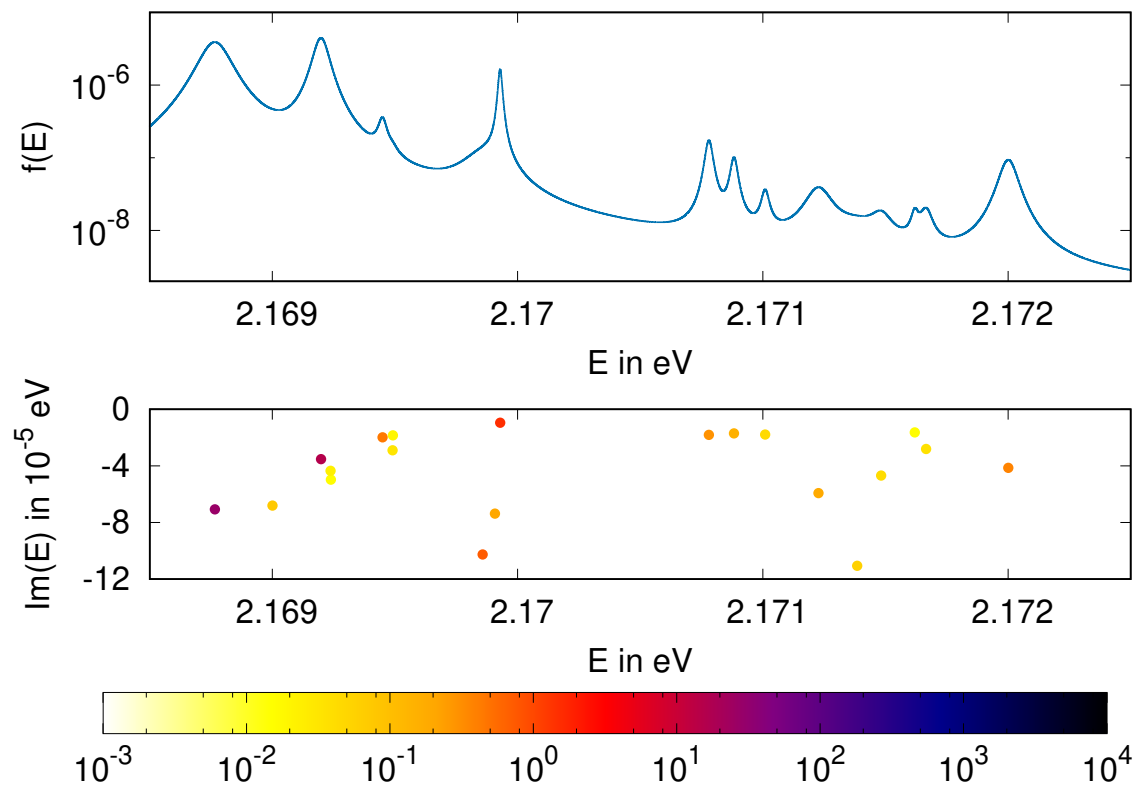


Abbildung 4.3: Spektrum, Lage und relative Oszillatorstärken der Resonanzen für eine elektrische Feldstärke von  $F = 21600 \text{ Vm}^{-1}$ .



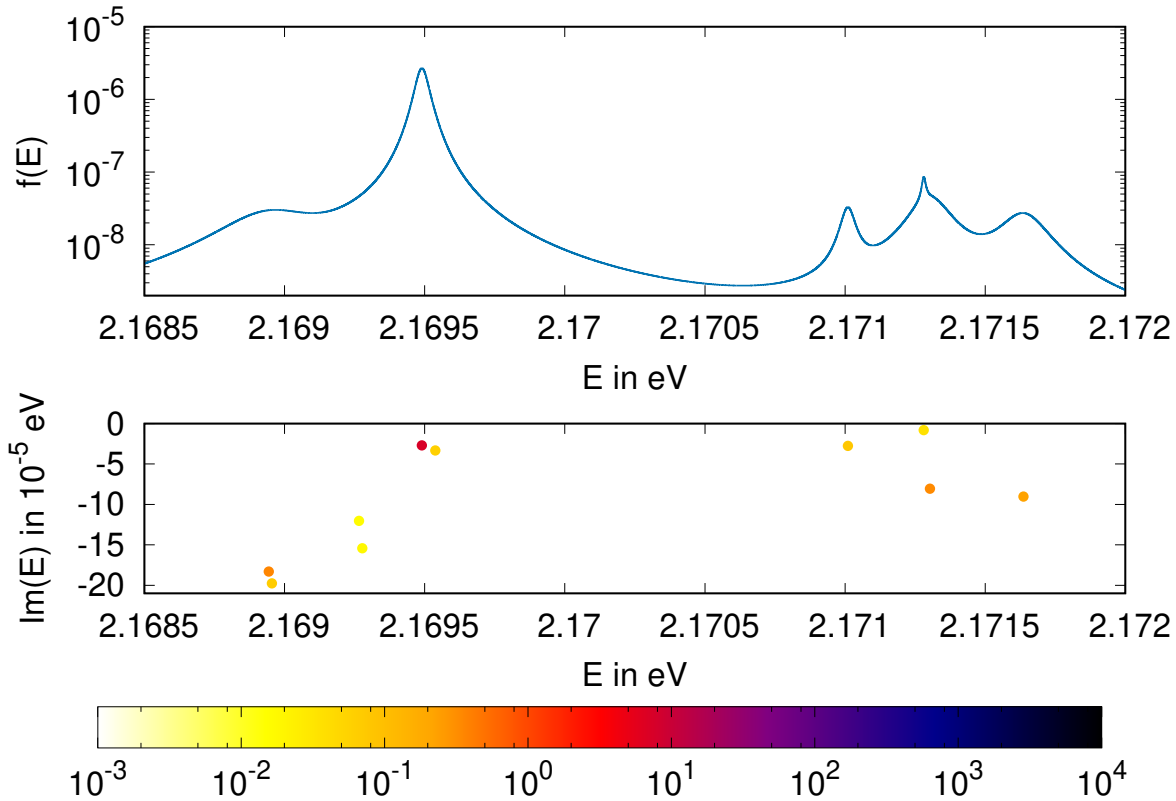


Abbildung 4.4: Spektrum, Lage und relative Oszillatorstärken der Resonanzen für eine elektrische Feldstärke von  $F = 28800 \text{ Vm}^{-1}$ .

Spektrum in Abbildung 4.4 besitzt deshalb auch breitere Peaks.

## 4.2 Parallele Felder, elektrisches und magnetisches Feld in [001]-Richtung

Neben dem elektrischen Feld in [001]-Richtung liegt nun zusätzlich ein Magnetfeld in [001]-Richtung an. Somit müssen alle Terme des Hamiltonian Gl. (2.21) berücksichtigt werden. Die relativen Oszillatorstärken wurden mit Gl. (2.60) und das Spektrum mit Gl. (2.63) berechnet. Wie auch zuvor lief der Drehwinkel von  $\theta = 0,1$  bis  $\theta = 0,3$  und die Quantenzahlen betragen  $n = 22$  und  $F_{\text{max}} = 15$ .

Abbildung 4.5 zeigt das Spektrum und die Lage der Resonanzen in der imaginären Ebene, bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 7200 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetischen Feldstärke von  $B = 0,25 \text{ T}$ . Die Farben der Energien geben die relativen Oszillatorstärken für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht an. Sie liegen im Bereich von  $10^{-1}$  bis  $10^1$ . Des Weiteren sind die gefundenen Resonanzen langlebig, da ihr Imaginärteil relativ groß ist. Im Spek-

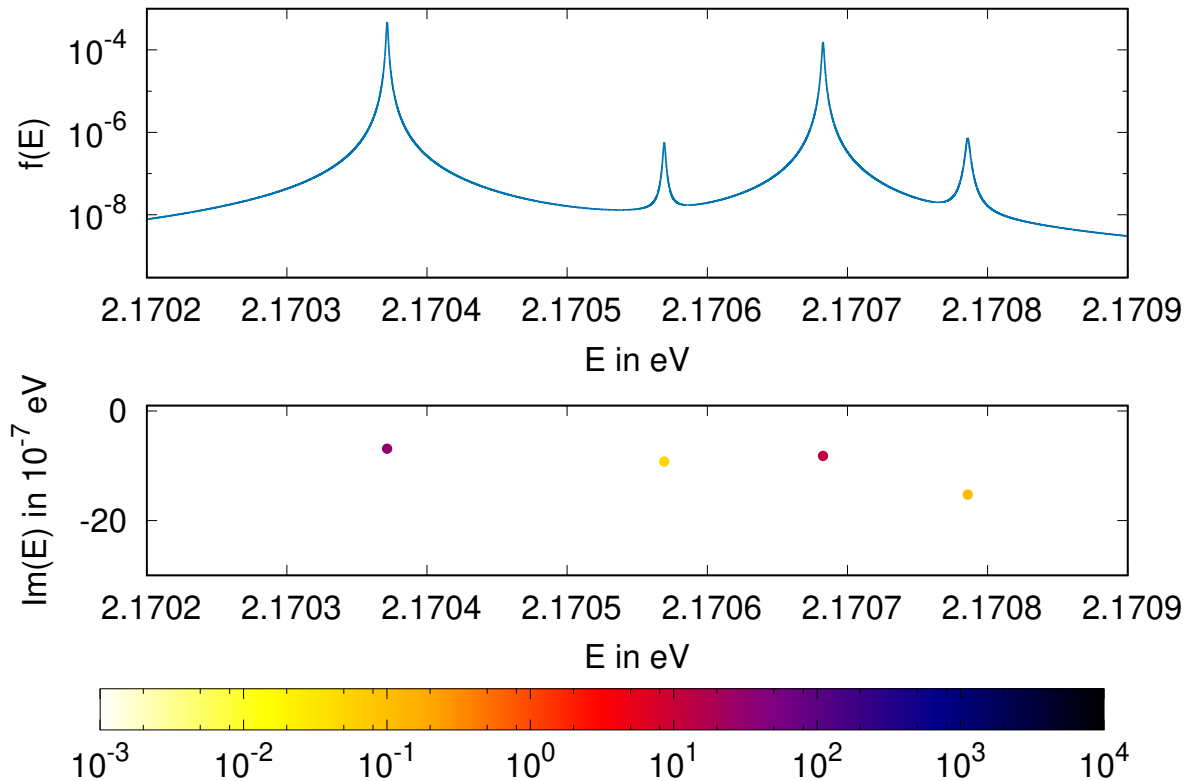


Abbildung 4.5: Der obere Plot zeigt das Spektrum und der unter die Lage der Resonanzen in der komplexen Ebene für eine elektrische Feldstärke von  $F = 7200 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetischen von  $B = 0,25 \text{ T}$ . Die relativen Oszillatorstärken entsprechen  $\sigma^-$  polarisiertes Licht.

trum können alle gefundenen Resonanzen beobachten werden. Zusätzlich erkennt man, dass die Resonanzen mit höherer Oszillatorstärke den größeren und breiteren Peaks zuzuordnen sind. Durch Ändern der Polarisation des eingestrahlteten Lichtes werden andere Resonanzen sichtbar. In [12] wurde der Einfluß von Magnetfelder auf das Exzitonenspektrum untersucht. Dabei zeigte sich, dass Aufgrund der Symmetrie unterschiedliche Exzitonenzustände mit  $\sigma^+$  und  $\sigma^-$  polarisierten Licht angeregt werden können. Abbildung 4.6 zeigt das Spektrum und die Position der gefundenen Resonanzen für  $\sigma^+$  polarisiertes Licht. Es fällt sofort auf, dass mehr Resonanzen mit dem  $\sigma^+$  polarisierten Licht koppeln als für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht. Die relativen Oszillatorstärken liegen im selben Bereich wie für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht. Auch hier werden alle bestimmten Resonanzen im Spektrum sichtbar. Im Vergleich mit nur einem elektrischen Feld (Abb. 4.1) äußert sich der Einfluß des magnetischen Feldes daran, dass für unterschiedlich polarisiertes Licht verschiedene Resonanzen gefunden werden, was beim elektrischen Feld nicht der Fall war.

Durch Erhöhen der elektrischen und magnetischen Feldstärke wird der Einfluß des ma-

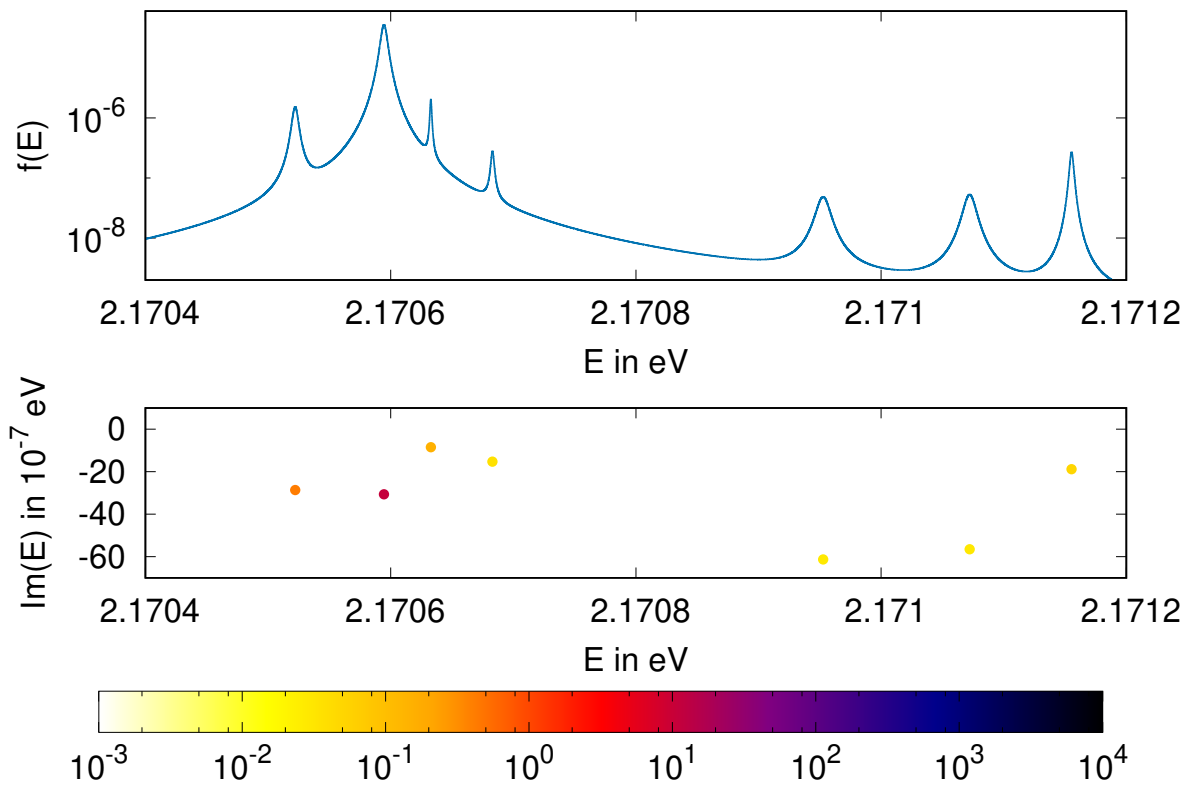


Abbildung 4.6: Spektrum und Resonanzen für eine elektrische Feldstärke von  $F = 7200 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetischen von  $B = 0,25 \text{ T}$ . Die relativen Oszillatorstärken gelten für  $\sigma^+$  polarisiertes Licht.

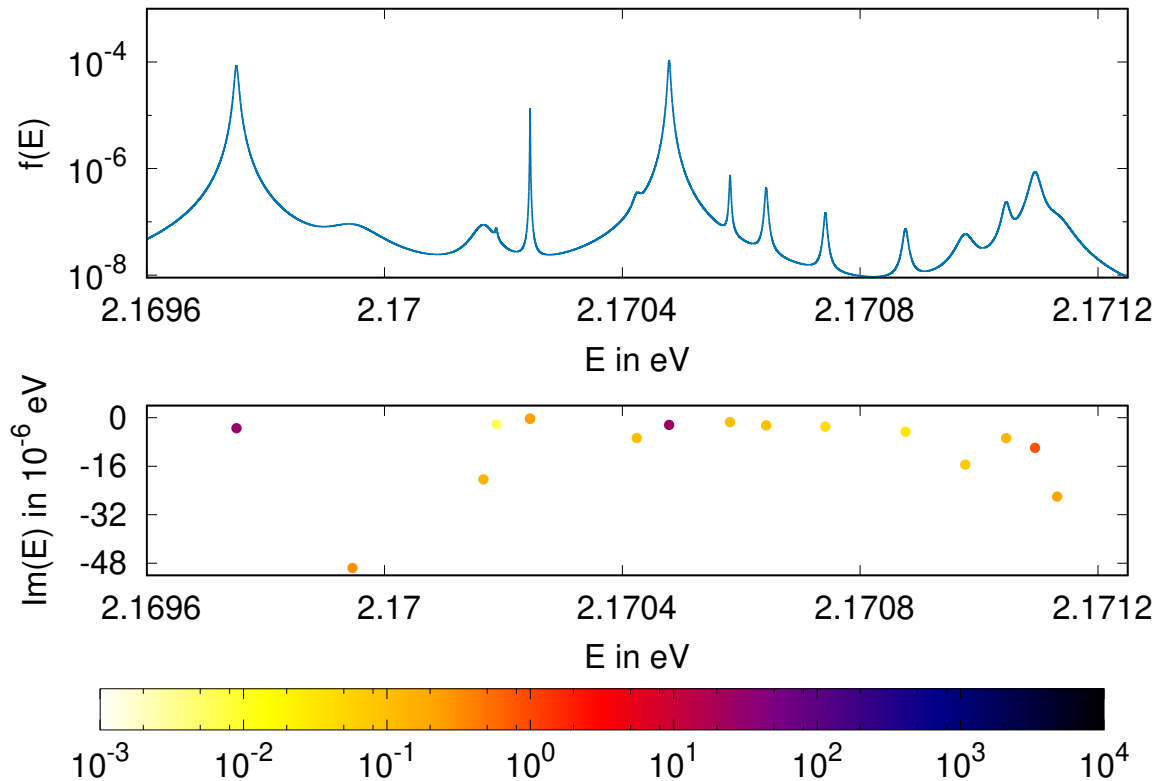


Abbildung 4.7: Spektrum und Resonanzen für eine elektrische Feldstärke von  $F = 14400 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetischen von  $B = 0,5 \text{ T}$ . Die relativen Oszillatorstärken gelten für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht.

gnetischen Feldes deutlicher. Die Abbildungen 4.7 und 4.8 zeigen das Spektrum und die Positionen der Resonanzen in der komplexen Ebene. Die elektrische Feldstärke betrug  $F = 14400 \text{ Vm}^{-1}$  und die magnetische Feldstärke  $B = 0,5 \text{ T}$ . Für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht (Abb. 4.7) konnten mehr Resonanzen gefunden werden als für  $\sigma^+$  polarisiertes Licht (Abb. 4.8). Aber mit beiden Polarisationen findet man mehr von ihnen als nur mit einem angelegten elektrischen Feld (Abb. 4.2). Zusätzlich sind die bestimmten Resonanzen in parallelen Feldern langlebiger und besitzen im Schnitt höhere relative Oszillatorstärken. Die beiden Spektren bestehen überwiegend aus dünnen Peaks und geben nahezu alle Resonanzen wieder.

Durch Erhöhen beider Feldstärken ( $F = 21600 \text{ Vm}^{-1}$ ,  $B = 0,75 \text{ T}$ ) stellt man für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht fest, dass weniger Resonanzen vorhanden sind (Abb.4.9). Dagegen werden für  $\sigma^+$  polarisiertes Licht mehr gefunden (Abb. 4.10). Ferner liegen die Oszillatorstärken von  $\sigma^-$  Licht im Bereich von  $10^{-2}$  bis  $10^2$ , während sie für  $\sigma^+$  im Bereich  $10^{-2}$  bis  $10^{-1}$  liegen. Das Spektrum der Resonanzen für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht besitzt breite Peaks, wodurch mehrere Resonanzen von diesen verschluckt werden. Im Vergleich

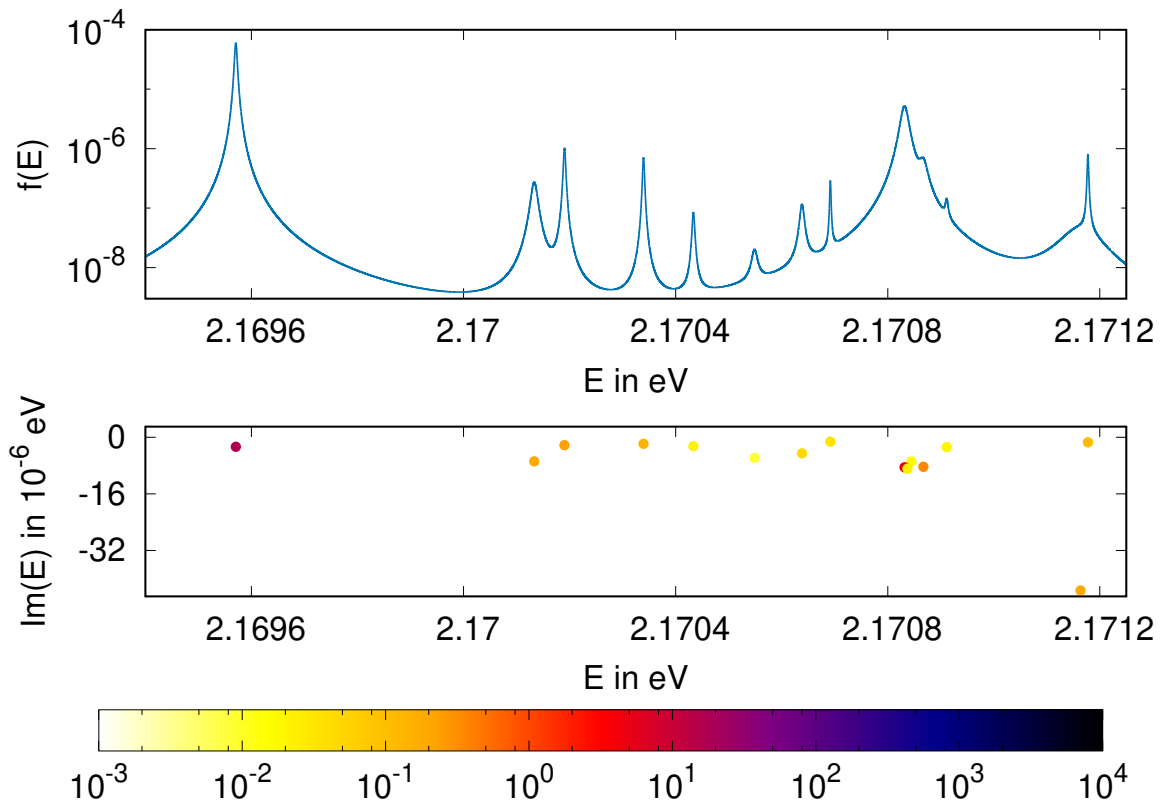


Abbildung 4.8: Für eine elektrische Feldstärke von  $F = 14400 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetischen von  $B = 0,5 \text{ T}$  wurden Resonanzen ermittelt und das Spektrum berechnet. Die relativen Oszillatorstärken gelten für  $\sigma^+$  polarisiertes Licht.

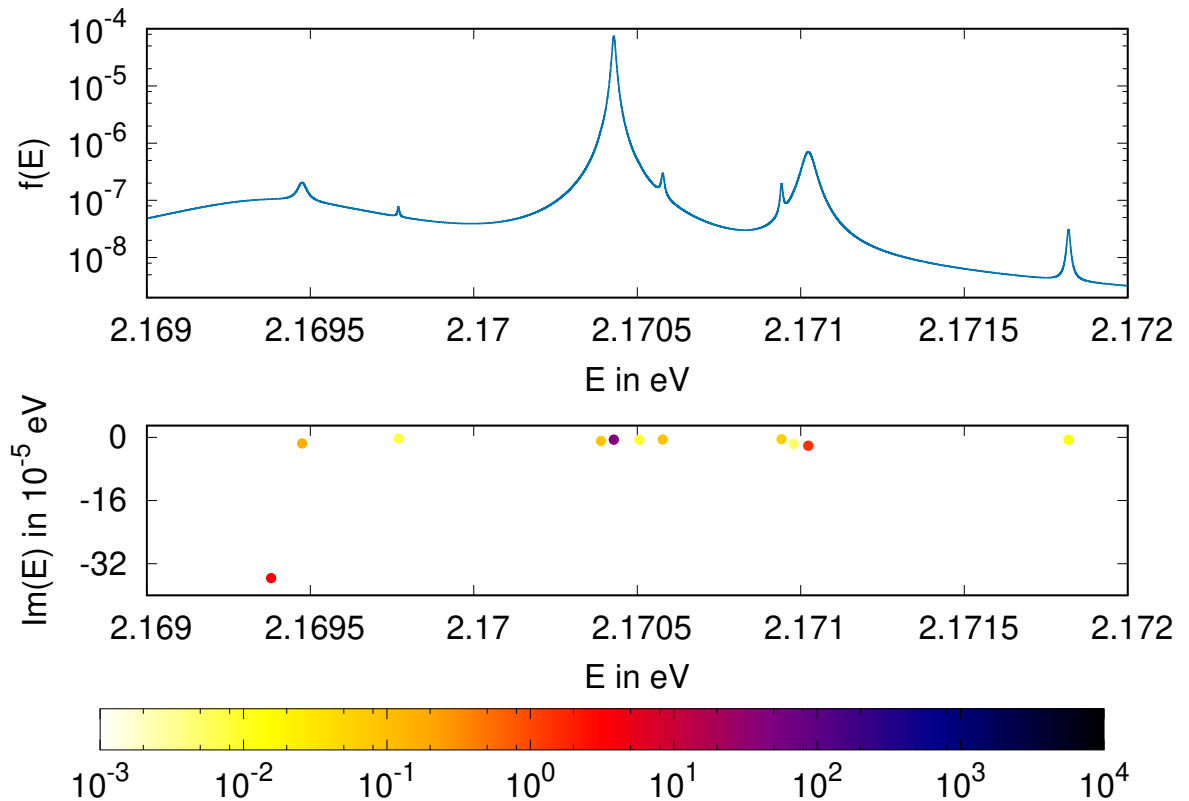


Abbildung 4.9: Spektrum und Resonanzen für eine elektrische Feldstärke von  $F = 21600 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetischen von  $B = 0,75 \text{ T}$ . Die relativen Oszillatorstärken gelten für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht.

dazu sind die Peaks des Spektrums für  $\sigma^+$  polarisiertes Licht dünner, so können die nah beieinander liegenden Resonanzen bei 2,171 eV noch einigermaßen auseinander gehalten werden.

Für ein magnetisches Feld mit  $B = 1 \text{ T}$  und einem elektrischen Feld mit  $F = 28800 \text{ Vm}^{-1}$  ergeben sich die Resonanzen und Spektren in Abbildung 4.11, für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht und in Abbildung 4.12, für  $\sigma^+$  polarisiertes Licht. Die Anzahl der Resonanzen nimmt wieder ab, was auf sich auf den Drehwinkel zurückführen lässt. Wie auch bei dem elektrischen Feld nehmen die Lebensdauern der Resonanzen mit steigender Feldstärke ab, wodurch ihre Imaginärteile negativer werden. Um diese mit der komplexen Koordinatenrotation aufdecken zu können, muss der Winkel entsprechend groß gewählt werden. Betrachtet man nur die beiden Spektren könnte man meinen, dass für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht mehr Resonanzen vorhanden sind, da dieses zehn Maxima besitzt und das für  $\sigma^+$  polarisiertes Licht nur acht. Es ist aber umgekehrt, wenn man sich die Resonanzen in der komplexen Ebene anschaut.

Letztendlich können mit einem zusätzlich angelegten Magnetfeld weitere Resonanzen

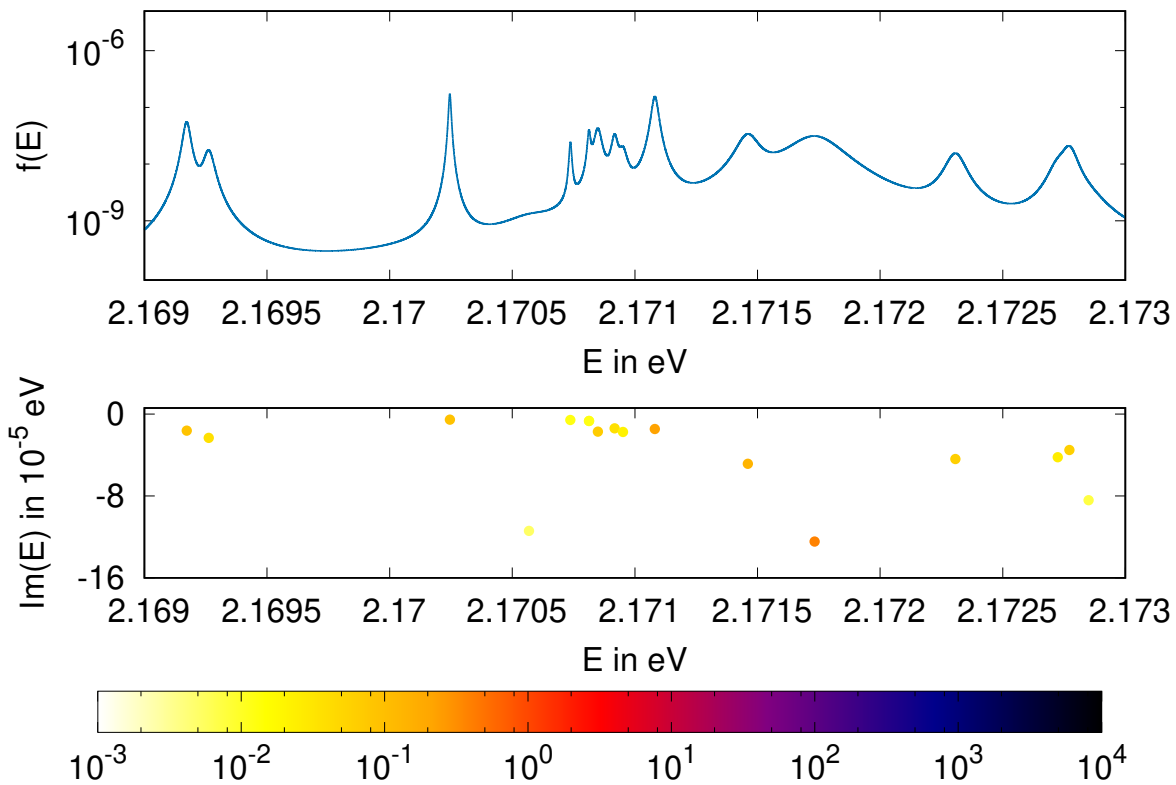


Abbildung 4.10: Spektrum und Resonanzen für eine elektrische Feldstärke von  $F = 21600 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetischen von  $B = 0,75 \text{ T}$ . Die relativen Oszillatorstärken gelten für  $\sigma^+$  polarisiertes Licht.

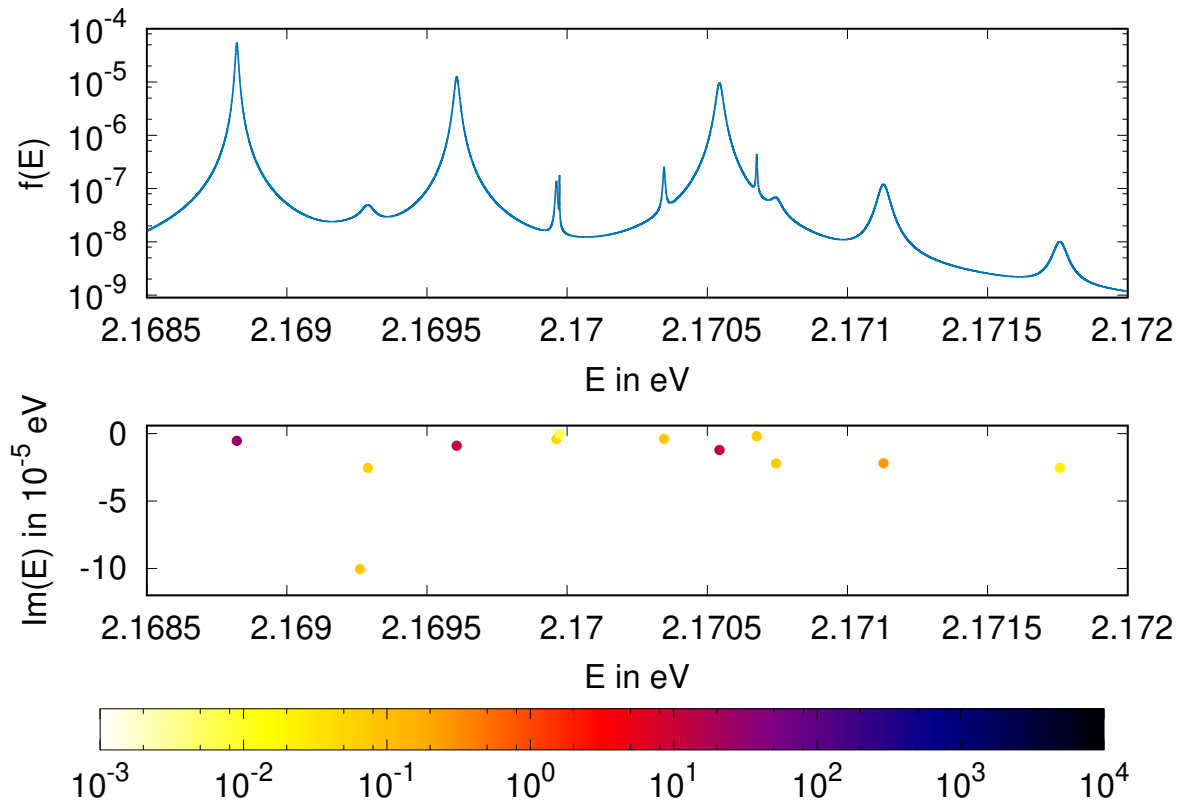


Abbildung 4.11: Spektrum und Resonanzen für eine elektrische Feldstärke von  $F = 28800 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetischen von  $B = 1 \text{ T}$ . Die relativen Oszillatorstärken gelten für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht.

zen gefunden werden. Dabei spielt auch die Polarisation des eingestrahlteten Lichtes eine Rolle. Vergleicht man die Anzahl der bestimmten Resonanzen in Abhängigkeit von der Polarisation, stellt man fest, dass man mehr mit  $\sigma^+$  polarisiertem Licht findet als mit  $\sigma^-$  polarisiertem Licht.



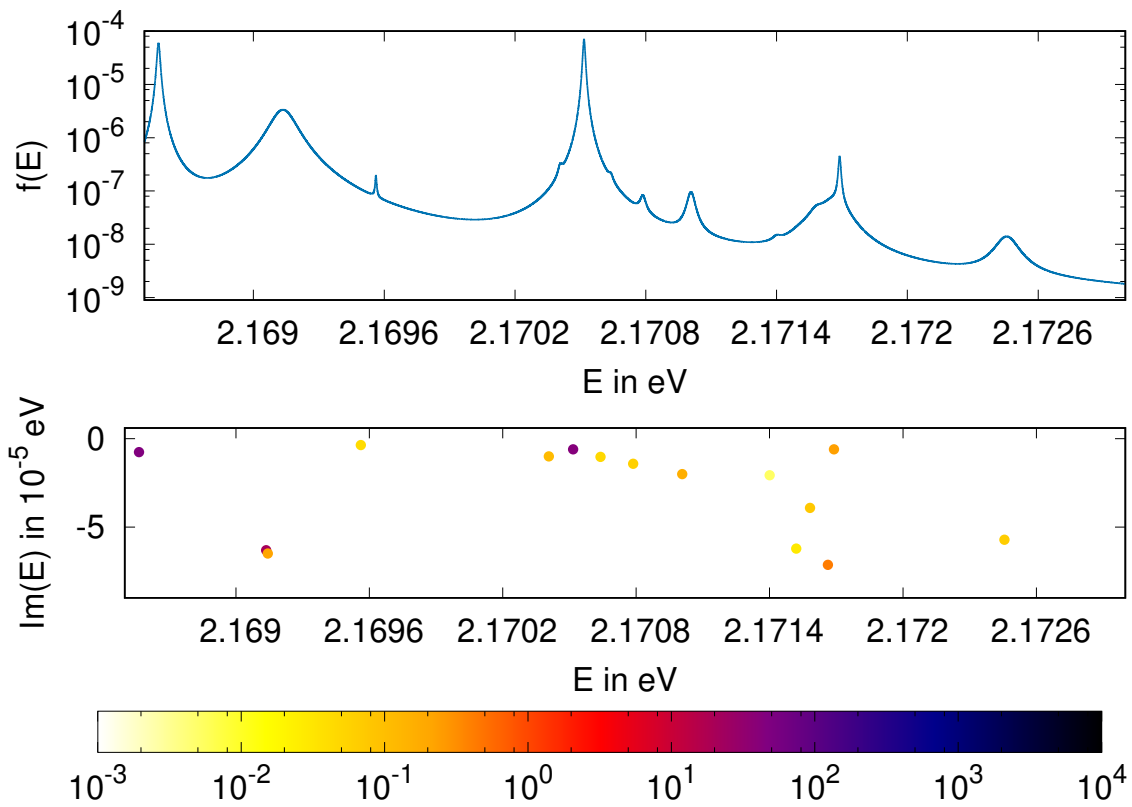


Abbildung 4.12: Spektrum und Resonanzen für eine elektrische Feldstärke von  $F = 28800 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetischen von  $B = 1 \text{ T}$ . Die relativen Oszillatorstärken gelten für  $\sigma^+$  polarisiertes Licht.



## 5 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war es mit Hilfe der komplexen Koordinatenrotation Resonanzen, sowie ihre Lage und das resultierende Spektrum in Kupferoxydul zu bestimmen. Damit resonante Zustände entstehen können, müssen stabile gebundene Zustände quasistabil werden. Dies wurde hier durch Anlegen eines elektrischen Feldes realisiert. Beim Drehen in die komplexe Ebene sind diese sichtbar geworden. Es wurde für vier verschiedene elektrische Feldstärken nach Resonanzen gesucht. Hierbei stellte sich heraus, dass für eine Feldstärke von  $21600 \text{ Vm}^{-1}$  die meisten Resonanzen auftauchen. Für höhere Feldstärken verringert sich die Zahl der aufgedeckten Resonanzen. Dies lag daran, dass der Drehwinkel zu klein war. Zusätzlich zu den Resonanzen wurden ihre relativen Oszillatorstärken, sowohl für  $\sigma^+$  und als auch für  $\sigma^-$  zirkular polarisiertes Licht berechnet und hiermit das Spektrum der Resonanzen ermittelt. Wenn nur ein elektrisches Feld anliegt wurden dieselben Resonanzen für  $\sigma^+$  und für  $\sigma^-$  polarisiertes Licht angeregt. Die Höhe und Breite der Peaks im Spektrum hängen vom Imaginärteil und der Oszillatorstärke der jeweiligen Resonanz ab. Ist z.B. der Imaginärteil nahe der Null (langlebiger Zustand) und die relative Oszillatorstärke groß, dann ist der Peak dünn und hoch. Andererseits ist der Peak breiter wenn der Imaginärteil klein und die Oszillatorstärke groß ist.

Des Weiteren wurden noch Resonanzen für parallele Felder ermittelt. Dazu musste parallel zum elektrischen Feld noch ein magnetisches angelegt werden. Für vier verschiedene Feldstärken konnten die Resonanzen, die relativen Oszillatorstärken und Spektren berechnet werden. Es wurden für  $\sigma^+$  polarisiertes Licht andere Resonanzen angeregt, wie bei  $\sigma^-$  polarisiertem Licht. Es stellte sich heraus, dass durch das zusätzliche Magnetfeld mehr Resonanzen angeregt werden als wenn nur ein elektrisches Feld anliegt. Am meisten Resonanzen wurden einer elektrischen Feldstärke von  $F = 21600 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetischen Feldstärke von  $B = 0,75 \text{ T}$  mit  $\sigma^+$  polarisiertem Licht beobachtet. Die Form der Peaks, in den Spektren hängt wie auch schon beim elektrischen Feld von dem Imaginärteil und der Oszillatorstärke des jeweiligen resonanten Zustandes ab.

Die so ermittelten Spektren können direkt mit Absorptionsspektren wie sie in [3] gemessen wurden verglichen werden, um zum Beispiel die genaue elektrische Feldstärke zu bestimmen. Des Weiteren kann über die Resonanzen nach exzeptionellen Punkten in Kupferoxydul gesucht werden [17, 18].



# 6 Anhang 1

## 6.1 Resonanzen und Oszillatorstärken für das externe elektrische Feld

Nachfolgend sind alle bestimmten Resonanzen und Oszillatorstärken für die verschiedenen elektrischen Feldstärken aufgelistet.

Tabelle 6.1: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 7200 \text{ Vm}^{-1}$ .

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5}$ eV	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-6}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1704302042	-2,51179	-1,8140	-9,899	42,70831032
2,1703820860	-0,08198	-7,6979	113,608	1883,26245430
2,1705434801	-1,20566	-0,7167	2,662	5,84599108
2,1706744108	-0,13061	0,5093	1,692	2,88125342
2,1708006439	-0,23376	0,1624	7,733	6,24411944
2,1708272369	-0,36279	-0,0419	-2,951	0,88878278
2,1709681726	-0,59287	-0,1193	9,801	23,84966541
2,1711633792	-0,43315	-0,1582	2,141	0,70894474
2,1711671218	-0,55258	0,9759	2,674	10,2402714
2,1712141016	-0,66081	0,3094	1,286	1,12280561
2,1712155098	-0,61010	0,0531	-5,375	2,91037693
2,1713539605	-2,54913	-0,5789	4,051	4,99314513

Tabelle 6.2: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 14400 \text{ Vm}^{-1}$ .

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5}$ eV	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1697770664	-10,45994	20,615	-15,403	66,22885288
2,1697819473	-9,19806	11,262	-8,678	20,21579616
2,1699533280	-3,81322	-8,004	-45,686	215,13550942
2,1699827793	-4,72176	2,416	6,454	4,75027818
2,1701963451	-0,24577	-4,616	0,871	2,20683668
2,1705570812	-1,02716	-3,101	-3,192	1,98119003
2,1705774007	-0,19406	2,955	1,566	1,11878970
2,1705892978	-1,04352	-1,997	-10,785	12,0308703
2,1706017562	-0,93790	-31,902	8,847	109,60272903
2,1709295549	-1,09673	3,543	1,380	1,44635743
2,1711417600	-3,94708	0,139	6,139	3,77080015
2,1714234468	-0,41985	6,598	-2,430	4,94553859
2,1714970398	-0,75257	3,329	4,655	3,27628902
2,1717467989	-1,99126	2,670	4,677	2,90125344
2,1722423953	-10,24464	1,224	3,209	1,18019117

Tabelle 6.3: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 21600 \text{ Vm}^{-1}$ .

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5}$ eV	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1687653564	-7,07492	14,378	82,057	2740,90185517
2,1690007024	-6,80556	-0,892	-8,501	7,30772876
2,1691982509	-3,52815	-76,450	97,572	1536,51226070
2,1692384097	-4,97475	-2,160	3,292	1,55056443
2,1692369519	-4,34846	-4,782	-0,105	2,28815383
2,1694491379	-1,98792	20,839	-3,153	44,42387804
2,1694900284	-2,89925	5,648	-0,701	3,24010463
2,1694912548	-1,84343	-1,943	3,964	1,94984145
2,1698576749	-1,02643	6,637	25,972	71,86450979
2,1699079186	-7,37661	12,745	5,869	1,96887114
2,1699287383	-9,56371	-36,095	13,492	148,49012977
2,1707802216	-1,81133	6,200	15,978	29,37500511
2,1708825184	-1,70834	4,255	11,483	14,99874545
2,1710096606	-1,78622	6,125	2,681	4,47090915
2,1712272005	-5,92518	12,511	-5,384	18,55248888
2,1713849603	-11,06276	3,800	6,549	5,73430097
2,1714825127	-4,68238	-5,600	3,279	4,21183482
2,1716198565	-1,63691	0,057	3,968	1,57558432
2,1716659882	-2,80018	3,786	-4,612	3,56147132
2,1720009571	-4,13978	-7,768	-17,726	37,45672616

Tabelle 6.4: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 28800 \text{ Vm}^{-1}$ .

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5}$ eV	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1689438753	-18,30149	7,280	-17,448	35,74359007
2,1689546742	-19,76114	-7,719	-2,667	6,66933193
2,1692657382	-12,02188	1,516	-3,720	1,61406880
2,1692775619	-15,42633	-4,233	0,428	1,81036306
2,1694901514	-2,69398	-37,751	75,886	718,37999895
2,1695380781	-3,32825	-0,728	-7,732	6,03078901
2,1710099204	-2,75538	8,792	-0,762	7,78852188
2,1712807400	-0,81345	-5,580	-2,255	3,62169914
2,1713026314	-8,05436	-7,531	16,668	33,45219712
2,1716362484	-9,03201	14,153	-4,517	22,07191096



## 6.2 Resonanzen und Oszillatorstärken paralleler Felder

In den folgenden Tabellen stehen alle ermittelten Resonanzen und Oszillatorstärken für die parallel angelegten elektrischen und magnetischen Felder.

Tabelle 6.5: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 7200 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetische Feldstärke von  $B = 0,25 \text{ T}$ . Das eingestrahelte Licht ist  $\sigma^-$  polarisiert.

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5} \text{ eV}$	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1703715387	-0,06878	22,526	175,796	3141,17721468
2,1705692926	-0,09209	-6,043	-3,577	4,93068160
2,1706825947	-0,08187	-39,262	-104,038	1236,53087086
2,1707858730	-0,15263	-9,772	-3,390	10,69841665

Tabelle 6.6: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 7200 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetische Feldstärke von  $B = 0,25 \text{ T}$ . Das eingestrahelte Licht ist  $\sigma^+$  polarisiert.

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5} \text{ eV}$	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1705221224	-0,28639	-19,521	6,179	41,92387150
2,1705945509	-0,30680	104,160	-6,350	1088,96334178
2,1706327751	-0,08481	10,381	-6,670	15,22532414
2,1706830413	-0,15270	5,936	0,638	3,56393831
2,1709527159	-0,61368	-5,235	-0,836	2,81000660
2,1710722205	-0,56574	3,120	4,380	2,89162675
2,1711553403	-0,18830	5,494	4,450	4,99818504

Tabelle 6.7: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 14400 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetische Feldstärke von  $B = 0,5 \text{ T}$ . Das eingestrahlte Licht ist  $\sigma^-$  polarisiert.

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5} \text{ eV}$	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1697508354	-0,34857	-150,562	82,382	2945,55465604
2,1702447589	-0,03399	5,543	13,706	21,85665415
2,1699459603	-4,95846	10,149	-14,116	30,22843348
2,1701663764	-2,03449	-11,589	-3,643	14,75784181
2,1701880340	-0,22153	-1,574	1,816	0,5775452
8 2,1702447620	-0,03269	2,585	-14,880	22,80896214
2,1704244255	-0,67351	0,350	-9,987	9,98677723
2,1704786634	-0,23653	144,437	66,654	2530,47573485
2,1705811929	-0,14520	6,367	7,635	9,88282503
2,1706419027	-0,25242	-9,244	4,083	10,21274928
2,1707414658	-0,29246	-5,122	-3,629	3,94072542
2,1708762531	-0,46527	3,827	3,973	3,04316329
2,1709768413	-1,54845	8,001	-2,511	7,03262140
2,1710456068	-0,67730	11,424	-0,232	13,05701093
2,1710941918	-0,99610	-27,696	7,524	82,36795556
2,1711313961	-2,60528	-12,361	-7,659	21,14516257

Tabelle 6.8: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 14400 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetische Feldstärke von  $B = 0,5 \text{ T}$ . Das eingestrahlte Licht ist  $\sigma^+$  polarisiert.

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5} \text{ eV}$	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1695704715	-0,27064	-106,929	-68,474	1612,23621341
2,1701333187	-0,68420	5,817	-12,213	18,29895539
2,1701903868	-0,22381	-6,310	-13,615	22,51754465
2,1704334794	-0,25420	4,343	1,247	2,04143299
2,1703393818	-0,18895	-8,003	-8,271	13,24639497
2,1705487909	-0,58746	-1,944	2,119	0,82683139
2,1706382533	-0,45578	-1,958	-6,597	4,73545957
2,1706917342	-0,12508	2,429	-5,213	3,30805611
2,1708447550	-0,68753	-3,284	-2,253	1,58654372
2,1708315858	-0,85181	56,313	34,515	436,24573993
2,1708371561	-0,89130	-3,250	3,599	2,35156537
2,1708671569	-0,83526	-8,796	16,514	35,00820976
2,1709112968	-0,27783	1,500	4,196	1,98570455
2,1711775315	-0,14535	8,094	6,676	11,00938034
2,1711636121	-4,33224	11,447	-7,165	18,23888764

Tabelle 6.9: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 21600 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetische Feldstärke von  $B = 0,75 \text{ T}$ . Das eingestrahelte Licht ist  $\sigma^-$  polarisiert.

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5} \text{ eV}$	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1693801737	-35,62687	-47,754	-35,780	356,06293184
2,1694751694	-1,50948	5,879	-11,449	16,56351952
2,1697696307	-0,29730	-0,950	2,602	0,76755100
2,1710233080	-2,12543	38,322	1,900	147,21779499
2,1709778577	-1,64917	1,771	-1,321	0,48807297
2,1703894001	-0,89482	0,781	8,999	8,15851722
2,1704285067	-0,58776	93,074	186,593	4347,96908997
2,1705062488	-0,61790	2,757	1,097	0,88043917
2,1705782469	-0,51468	8,455	-4,223	8,93183619
2,1709414583	-0,43181	-7,659	-0,581	5,90044409
2,1718190689	-0,55317	-3,725	0,988	1,48518956

Tabelle 6.10: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 21600 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetische Feldstärke von  $0,75 \text{ T}$ . Das eingestrahlte Licht ist  $\sigma^+$  polarisiert.

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5} \text{ eV}$	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1691723081	-1,61937	-5,125	-7,852	8,79221003
2,1692621606	-2,32033	5,366	-2,837	3,68454615
2,1702453746	-0,53774	0,463	9,562	9,16476622
2,1705683654	-11,40772	0,159	-2,253	0,51019462
2,1707370650	-0,56764	-0,533	-3,467	1,23045384
2,1708128050	-0,66031	1,552	-2,468	0,84995247
2,1708489843	-1,70586	-3,302	7,458	6,65323309
2,1709173805	-1,39125	4,316	-4,289	3,70221810
2,1709516652	-1,74487	-4,665	-0,450	2,19653025
2,1710816053	-1,45850	12,879	-7,572	22,31838012
2,1717327927	-12,46255	-10,627	16,235	37,65175004
2,1728503465	-8,41699	-2,668	0,332	0,72311969
2,1727243118	-4,20690	4,854	-1,264	2,51595505
2,1727716744	-3,50811	7,625	-1,530	6,04751406
2,1723071046	-4,39257	2,860	7,266	6,09767491
2,1708127889	-0,66364	-2,615	-2,266	1,19740907
2,1714604781	-4,85121	-11,366	2,993	13,81358621

Tabelle 6.11: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 28800 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetische Feldstärke von 1 T. Das eingestrahelte Licht ist  $\sigma^-$  polarisiert.

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5} \text{ eV}$	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1688215583	-0,53029	158,914	-58,145	2863,46191373
2,1692888873	-2,53547	-2,149	7,494	6,07781657
2,1696060707	-0,89819	-89,406	-56,259	1115,85425133
2,1699616666	-0,40644	0,013	-7,072	5,00122149
2,1699727516	-0,04766	-0,801	-2,570	0,72461035
2,1703457253	-0,38583	8,971	-0,968	8,14231278
2,1705437021	-1,20890	55,342	92,417	1160,36322509
2,1706763640	-0,19630	-6,926	-4,788	7,08918356
2,1707455692	-2,20868	-3,273	-7,740	7,06206405
2,1711287028	-2,19929	-15,540	-3,200	25,17265301
2,1717581872	-2,54357	-3,154	3,454	2,18733787
2,1692609925	-10,05230	3,951	8,081	8,09175552

Tabelle 6.12: Resonanzen und Oszillatorstärken bei einer elektrischen Feldstärke von  $F = 28800 \text{ Vm}^{-1}$  und einer magnetische Feldstärke von  $B = 1 \text{ T}$ . Das eingestrahlte Licht ist  $\sigma^+$  polarisiert.

Re(E) in eV	Im(E) in $10^{-5} \text{ eV}$	Re( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	Im( $f_{\text{rel}}$ ) in $10^{-7}$	$ f_{\text{rel}} ^2$ in $10^{-2}$
2,1685645327	-0,76043	24,517	-210,205	4478,73835604
2,1691356832	-6,31280	131,064	60,877	2088,39104314
2,1691437356	-6,49421	13,385	-5,865	21,35454358
2,1695620030	-0,36673	2,051	-6,232	4,30508555
2,1704074221	-1,00013	-4,337	9,639	11,17250532
2,1705166363	-0,60280	203,588	-20,415	4186,47883000
2,1706399347	-1,03610	5,435	4,278	4,78440579
2,1707867976	-1,41798	4,899	5,986	5,98262596
2,1710074183	-2,00666	7,885	-9,925	16,06851697
2,1714006977	-2,07199	1,515	-1,693	0,51606734
2,1715199240	-6,22008	5,146	1,500	2,87366243
2,1715822158	-3,91689	-8,570	1,271	7,50561310
2,1716624444	-7,13107	-12,171	-16,511	42,07244455
2,1716892808	-0,60622	12,576	8,657	23,31011123
2,1724560810	-5,72107	-7,958	-1,354	6,51583604





# Literaturverzeichnis

- [1] Kazimierczuk T., Fröhlich D., Scheel S., Stolz H. und Bayer M. Giant Rydberg excitons in the copper oxide Cu<sub>2</sub>O. *Nature* 514, 343 (2014).
- [2] 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<sub>2</sub>O from the hydrogen series. *Phys. Rev. B* 93, 075203 (2016).
- [3] J. Heckötter, M. Freitag, D. Fröhlich, M. Aßmann, M. Bayer, M. A. Semina und M. M. Glazov. High-resolution study of the yellow excitons in Cu<sub>2</sub>O subject to an electric field. *Phys. Rev. B* 95, 035210 (2017).
- [4] F. Schweiner. Theory of excitons in cuprous oxide. *Doktorarbeit, Universität Stuttgart* (2017).
- [5] W P Reinhardt. Complex Coordinates in the Theory of Atomic and Molecular Structure and Dynamics. *Annual Review of Physical Chemistry* 33, 223–255 (1982).
- [6] Nimrod Moiseyev. Quantum Theory of Resonances: Calculating Energies, Widths and Cross-Sections by Complex Scaling 302, 211–293 (1998).
- [7] U. Rössler. *Solid State Theory: An Introduction*. Advanced Texts in Physics. Springer Berlin Heidelberg (2004).
- [8] R. Gross und A. Marx. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag (2012).
- [9] C.F. Klingshirn. *Semiconductor Optics*. Advanced Texts in Physics. Springer Berlin Heidelberg (2007).
- [10] Gregory H. Wannier. The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals. *Phys. Rev.* 52, 191–197 (1937).
- [11] Frank Schweiner, Jörg Main, Matthias Feldmaier, Günter Wunner und Christoph Uihlein. Impact of the valence band structure of Cu<sub>2</sub>O on excitonic spectra. *Phys. Rev. B* 93, 195203 (2016).
- [12] Frank Schweiner, Jörg Main, Günter Wunner, Marcel Freitag, Julian Heckötter, Christoph Uihlein, Marc Aßmann, Dietmar Fröhlich und Manfred Bayer. Magnetoexcitons in cuprous oxide. *Phys. Rev. B* 95, 035202 (2017).

- [13] Frank Schweiner, Jörg Main, Günter Wunner und Christoph Uihlein. Even exciton series in  $\text{Cu}_2\text{O}$ . *Phys. Rev. B* 95, 195201 (2017).
- [14] H. Cartarius. Exceptional points in atomic spectra and Bose-Einstein condensates. *Doktorarbeit, Universität Stuttgart* (2008).
- [15] Thomas N. Rescigno und Vincent McKoy. Rigorous method for computing photoabsorption cross sections from a basis-set expansion. *Phys. Rev. A* 12, 522–525 (1975).
- [16] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, L. S. Blackford, J. Demmel, Jack J. Dongarra, J. Du Croz, S. Hammarling, A. Greenbaum, A. McKenney und D. Sorensen. *LAPACK Users' Guide (Third Ed.)*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA (1999).
- [17] M. Feldmaier. Untersuchung exzeptioneller Punkte bei Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern. *Masterarbeit, Universität Stuttgart* (2015).
- [18] Matthias Feldmaier, Jörg Main, Frank Schweiner, Holger Cartarius und Günter Wunner. Rydberg systems in parallel electric and magnetic fields: an improved method for finding exceptional points. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 49, 144002 (2016).

# Danksagung

Hiermit möchte ich mich bei allen bedanken, die mich in meinem Studium und bei der Ausarbeitung meiner Masterarbeit unterstützt haben. Besonders möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Jörg Main für die Gelegenheit, meine Masterarbeit am 1. Institut für Theoretische Physik schreiben zu dürfen und für seine hervorragende Betreuung bedanken. Zusätzlich bedanke ich mich bei Frau Prof. Dr. Maria Daghofer, die den Mitbericht zu dieser Masterarbeit übernommen hat. Weiter möchte ich mich bei Dr. Frank Schweiner für die Bereitstellung seines Programms und seine Bereitschaft mir bei auftretenden Problemen zu helfen, bedanken. Eine große Hilfe war auch Patric Rommel, welcher mir bei Fragen immer weiter helfen konnte. Zuletzt möchte ich mich noch bei meiner Familie und Freunden für die Unterstützung während des gesamten Studiums bedanken.



## Erklärung

Ich versichere,

- 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,
- und dass das elektronische Exemplar mit den anderen Exemplaren übereinstimmt.

Stuttgart, den 16. November 2018

*Patrik Zielinski*