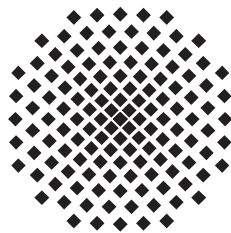


# Matrixmodell zur Beschreibung der Zustandsvertauschung bei exzeptionellen Punkten des Wasserstoffatoms in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern

Bachelorarbeit von  
**Jan Burkhardt**

18. August 2016

Prüfer: Apl. Prof. Dr. Jörg Main



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



# Inhaltsverzeichnis

|   |           |
|---|-----------|
| <b>1. Einleitung</b>  | <b>5</b>  |
| 1.1. Motivation und Einführung in das Thema . . . . .                         | 5         |
| 1.2. Aufbau der Arbeit . . . . .  | 5         |
| <b>2. Grundlagen</b>  | <b>7</b>  |
| 2.1. Das Wasserstoffatom im parallelen elektrischen und magnetischen Feld .   | 7         |
| 2.2. Resonanzen . . . . .   | 8         |
| 2.3. Beispiel für einen exzeptionellen Punkt . . . . .                        | 8         |
| <b>3. Das Matrixmodell</b>  | <b>13</b> |
| 3.1. Motivation des Matrixmodells . . . . .                                   | 13        |
| 3.2. Konstruktion der Matrix . . . . .  | 14        |
| 3.3. Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix . . . . .                        | 16        |
| 3.4. Umkreisung eines exzeptionellen Punktes . . . . .                        | 16        |
| 3.4.1. Stationäre Umkreisung . . . . .  | 16        |
| 3.4.2. Dynamische Umkreisung . . . . .  | 17        |
| 3.5. Die stationäre Schrödingergleichung . . . . .                            | 18        |
| 3.6. Die dynamische Schrödingergleichung . . . . .                            | 18        |
| 3.7. Die Untersuchung der Besetzung . . . . .                                 | 19        |
| <b>4. Ergebnisse und Diskussion</b>   | <b>21</b> |
| 4.1. Wahl des exzeptionellen Punktes . . . . .                                | 21        |
| 4.2. Stationäre Umkreisung . . . . .  | 21        |
| 4.3. Überprüfung der numerischen Genauigkeit . . . . .                        | 23        |
| 4.4. Abhängigkeit der Dynamik vom Parameter $c$ . . . . .                     | 23        |
| 4.5. Schnelle Umkreisung . . . . .  | 26        |
| 4.6. Langsame Umkreisung . . . . .  | 26        |
| 4.7. Vergleich der Umkreisungen in Abhängigkeit der Umlaufdauer $T$ . . . . . | 29        |
| 4.8. Änderung des Startwinkels . . . . .                                      | 31        |
| 4.9. Änderung des Radius der Umkreisung . . . . .                             | 32        |
| <b>5. Zusammenfassung und Ausblick</b>  | <b>35</b> |
| <b>A. Hartree-Einheiten</b>   | <b>37</b> |

|                                     |           |
|-------------------------------------|-----------|
| <b>B. Das Runge-Kutta-Verfahren</b> | <b>39</b> |
| <b>Literaturverzeichnis</b>         | <b>41</b> |
| <b>Danksagung</b>                   | <b>43</b> |

# 1. Einleitung

## 1.1. Motivation und Einführung in das Thema

Beim Wasserstoffatom in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern kann es, bedingt durch das elektrische Feld, zur Bildung von Resonanzen kommen. Dies sind metastabile Zustände mit einer endlichen Lebensdauer. An besonderen, kritischen Punkten können diese Resonanzen entarten. Das Besondere dabei ist, dass an diesen Punkten, die exzeptionelle Punkte oder EP genannt werden, nicht nur die Eigenwerte sondern auch die Eigenvektoren entarten.

Bei einer Umkreisung eines exzeptionellen Punktes kommt es zu einer Vertauschung zweier Zustände. Die einfachste Möglichkeit ein solches System zu beschreiben ist ein zweidimensionales Matrixmodell, welches in dieser Arbeit entwickelt und getestet wird. Hierbei werden jedoch nur die beiden vertauschenden Zustände betrachtet, alle Kopplungen mit anderen Zuständen werden vernachlässigt. Das Matrixmodell selbst enthält Parameter, welche aus dem vollständigen Problem heraus entwickelt wurden um den statischen Fall zu beschreiben. Es soll verwendet werden um eine dynamische Umkreisung exzeptioneller Punkte zu untersuchen. Der Grund für die Verwendung des Matrixmodelles anstatt des vollständigen Problems liegt in dessen Einfachheit, welche auch die Rechendauer deutlich verkürzt.

## 1.2. Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 werden die Grundlagen dargestellt. Dafür wird das eigentliche Problem des Wasserstoffatoms im parallelen elektrischen und magnetischen Feld beschrieben. Anschließend wird darauf eingegangen, was Resonanzen sind und zuletzt werden die Grundlagen eines exzeptionellen Punkt erklärt und dessen Eigenschaften an einem einfachen Beispiel erläutert.

In Kapitel 3 wird das Matrixmodell konstruiert und erklärt. Außerdem werden seine Anwendung und die Grundlagen der Berechnungen gezeigt. Dazu werden die Schrödingergleichung und die Umkreisung des exzeptionellen Punktes beschrieben. Zuletzt wird geklärt, was mit dem Modell untersucht werden soll.

Kapitel 4 zeigt die Ergebnisse der Berechnungen. Dazu wird am Anfang eine stationäre Umkreisung durchgeführt. Diese zeigt das Verhalten bei der Umrundung eines exzeptio-

## 1. Einleitung

---

nellen Punktes und ist deshalb wichtig für die dynamische Berechnung, da die Basis des statischen Systems in der Dynamik als mitgeführte Basis verwendet wird.

Für die dynamische Umkreisung wird die zeitabhängige Wellenfunktion auf die mitgeführte Basis projiziert. Dadurch kann beobachtet werden, wie sich die Population auf die beiden Zustände aufteilt. Um ein Vertauschungsverhalten auch hier zu untersuchen, wird die Umlaufzeit  $T$  variiert und das Ergebnis diskutiert.

Damit die Population nach einer vollständigen Umrundung maximiert, werden neben der Umlaufdauer auch der Startpunkt und der Radius der Kurve der Umkreisung verändert. Außerdem werden Vergleiche mit der Lösung des vollständigen Problems vorgenommen.

## 2. Grundlagen

In diesem Kapitel werden die Grundlagen beschrieben, die zur Entwicklung des Matrixmodells führen. Dazu wird zunächst in Abschnitt 2.1 das Wasserstoffatom im parallelen elektrischen und magnetischen Feld beschrieben. Abschnitt 2.2 beschreibt anschließend Resonanzen, also metastabile Zustände, da diese im Wasserstoffatom zu exzeptionellen Punkten führen. Im letzten Abschnitt 2.3 werden die Grundlagen eines exzeptionellen Punktes beschrieben und ein einfaches Beispiel dazu angegeben.

### 2.1. Das Wasserstoffatom im parallelen elektrischen und magnetischen Feld

Befindet sich ein Wasserstoffatom in einem parallelen elektrischen und magnetischen Feld der Form

$$\vec{E} = F\vec{e}_z \quad \text{und} \quad \vec{B} = B\vec{e}_z \quad (2.1)$$

kann nach [1] ein Hamilton-Operator der Form

$$H = \frac{1}{2m_e}\vec{p}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{e}{2m_e}BL_z + \frac{e^2}{8m_e}B^2(x^2 + y^2) + eFz \quad (2.2)$$

verwendet werden. Er besteht aus der kinetischen Energie  $\propto \vec{p}^2$ , dem Coulomb-Potential  $\propto \frac{1}{r}$ , dem paramagnetischen Term  $\propto BL_z$ , dem diamagnetischen Term  $\propto B^2(x^2 + y^2)$  und dem elektrischen Potential  $\propto Fz$ . Dabei ist  $\vec{p}$  der Impuls des Elektrons,  $r$  der radiale Abstand zum Kern des Wasserstoffatom und  $L_z$  die  $z$ -Komponente des Drehimpulses. Im Folgenden werden Hartree-Einheiten verwendet, wie sie in Anhang A beschrieben werden. Damit lautet der Hamilton-Operator

$$H = \frac{1}{2m_e}\vec{p}^2 - \frac{1}{r} + \frac{1}{2}\gamma L_z + \frac{1}{8}\gamma^2(x^2 + y^2) + fz \quad , \quad (2.3)$$

wobei  $f = F/F_0$  für die Beschreibung des elektrischen und  $\gamma = B/B_0$  für die des magnetischen Feldes verwendet wird. Die Energie wird in Einheiten der Hartree-Energie  $E_H = 4,36 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 27,21 \text{ eV}$  gemessen, außerdem gilt  $F_0 = 5,14 \cdot 10^{11} \text{ V/m}$  und  $B_0 = 2,35 \cdot 10^5 \text{ T}$ .

Eine Möglichkeit zur numerischen Lösung der Schrödingergleichung ist die Diagonalisierung in der Basis eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators, wie es in [1]

beschrieben ist. Dabei wird außerdem eine komplexe Rotation durchgeführt, die zu Resonanzen führt. Da der harmonische Oszillator eine unendlich-dimensionale Basis besitzt, muss ab einem endlichen Zustand abgebrochen werden.

### 2.2. Resonanzen

Eine Möglichkeit zur Entstehung exzeptioneller Punkte sind Resonanzen. Dies sind Zustände mit einer begrenzten Lebensdauer, was bedeutet dass sie zerfallen. Ein einfaches mathematisches Modell zur Beschreibung nach [2] ist ein Zustand  $\Psi_R(t)$  mit

$$\Psi_R(t) = e^{-i\frac{E_R t}{\hbar}} \Psi_R(0) \quad . \quad (2.4)$$

Durch die komplexe Energie

$$E_R = E_{\text{res}} - i\frac{\Gamma}{2} \quad (2.5)$$

mit reellem  $E_{\text{res}}$  und positivem reellem  $\Gamma$  zerfällt der Zustand exponentiell, für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit gilt also

$$|\Psi_R(t)|^2 \propto e^{-\Gamma t} \quad . \quad (2.6)$$

Ein anschauliches Beispiel ist in Abbildung 2.1 dargestellt. Hier ist in (a) ein gebundener Zustand in einem Coulomb-Potential zu erkennen. Wird nun ein elektrisches Feld  $f = F/F_0$  angelegt, erweitert sich das Coulomb-Potential zu einem Coulomb-Stark-Potential. Aus diesem kann der vorher gebundene Zustand nun mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit tunneln, er ist demnach metastabil.

Dieser Zustand, der eine bestimmte Lebensdauer besitzt, wird als Resonanzzustand bezeichnet. Da diese Resonanzen komplexe Energiewerte besitzen, können sie nicht als Observable eines hermiteschen Operators beschrieben werden. Durch eine komplexe Rotation können jedoch nicht-hermitesche Operatoren entstehen, die das Problem beschreiben. Dies ist in [3] beschrieben.

### 2.3. Beispiel für einen exzeptionellen Punkt

Exzeptionelle Punkte sind besondere Ausnahmepunkte im Parameterraum. Direkt am exzeptionellen Punkt entarten nicht nur die Energieeigenwerte sondern auch die Wellenfunktionen [4]. Die Dimension des Eigenraumes verkleinert sich dort somit, da es nur noch einen Eigenvektor gibt. Eine besondere Eigenschaft ist, dass bei einer Umrundung des exzeptionellen Punktes im Parameterraum die am EP entarteten Zustände miteinander vertauschen.



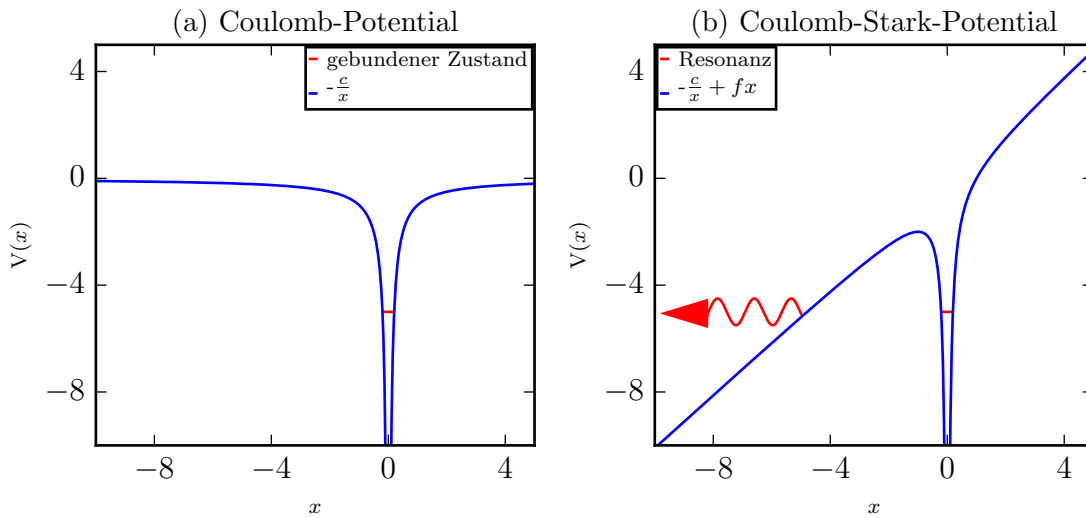


Abbildung 2.1.: (a) Graphische Auftragung des Coulomb-Potentials  $V(x) = -c/x$ . Es sind für  $E > 0$  Streuzustände und für  $E < 0$  gebundene Zustände möglich. Ein solcher gebundener Zustand ist mit einer roten Linie im Potential eingezeichnet.

(b) Ein Coulomb-Stark-Potential, hier erzeugt durch Erweiterung des Coulomb-Potentials durch ein Potentialterm  $fx$  mit einem elektrischen Feld der Stärke  $f = F/F_0$ . Hier kann der Zustand, der im Coulomb-Potential noch gebunden war, mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durch die Potentialbarriere tunneln, wodurch er in einen Streuzustand übergeht. Ein solcher metastabiler Zustand wird als Resonanz bezeichnet. Nach einer Abbildung aus [1]

Ein einfaches Beispiel, das alle mathematischen Eigenschaften leicht zeigt, ist die lineare Abbildung in Form einer Matrix nach [4]

$$\underline{\underline{M}}(\kappa) = \begin{pmatrix} 1 & \kappa \\ \kappa & -1 \end{pmatrix} \quad ; \quad \kappa \in \mathbb{C} \quad (2.7)$$

mit den beiden Eigenwerten

$$\lambda_1(\kappa) = \sqrt{1 + \kappa^2} \quad (2.8)$$

und

$$\lambda_2(\kappa) = -\sqrt{1 + \kappa^2} \quad (2.9)$$

und den dazugehörigen Eigenvektoren

$$\vec{v}_1(\kappa) = \begin{pmatrix} -\kappa \\ 1 - \sqrt{1 + \kappa^2} \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

und

$$\vec{v}_2(\kappa) = \begin{pmatrix} -\kappa \\ 1 + \sqrt{1 + \kappa^2} \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

Es ist gut zu erkennen, dass sowohl die Eigenwerte, als auch die Eigenvektoren bei  $\kappa = \pm i$  entarten

$$\lambda_{1,2}(\pm i) = 0 \quad \text{und} \quad \vec{v}_{1,2}(\pm i) = \begin{pmatrix} \pm i \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

In Abbildung 2.2 ist eine kreisförmige Umrundung des exzeptionellen Punktes an der Stelle  $\kappa = i$  mit der Parametrisierung  $\kappa(\varphi) = i + \rho \exp(i\varphi)$  dargestellt. Hierbei ist in (a) die Umrundung im Parameterraum und in (b) die Eigenwerte im Energieraum zu sehen. Zu jedem Punkt im Parameterraum gehören zwei Eigenwerte, welche zur Unterscheidung farblich sortiert werden. Bei einer kleinen Änderung im Parameterraum ändern sich auch die Eigenwerte nur geringfügig. Die beiden neuen Eigenwerte werden deshalb immer nach dem kürzesten Abstand zum vorherigen Eigenwert sortiert. Es ist hier das typische Vertauschungsverhalten nach einer ganzen Umrundung zu erkennen. Eine andere mögliche geschlossene Umrundung des exzeptionellen Punktes ist eine elliptische Umrundung mit  $\kappa(\varphi) = i + \rho_1 \cos(\varphi) + i\rho_2 \sin(\varphi)$ , wie sie in Abbildung 2.3 dargestellt ist. Hierbei verändert sich die vorher kreisförmige Trajektorie der Eigenwerte zu einer sternförmigen, da der Abstand von  $\kappa$  zum exzeptionellen Punkt nicht mehr konstant bleibt. Für Punkte, die näher am exzeptionellen Punkt liegen, befinden sich auch die beiden dazugehörigen Eigenwerte näher beieinander.

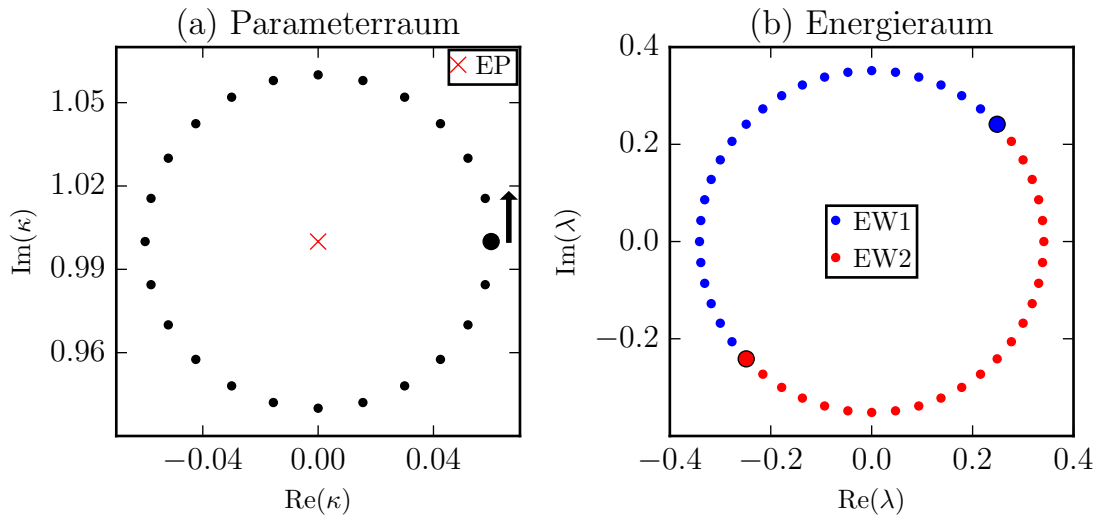


Abbildung 2.2.: (a) Kreisförmige Umrundung des exceptionellen Punktes an der Stelle  $\kappa = i$  mit  $\kappa(\varphi) = i + \rho \exp(i\varphi)$  im Parameterraum.  
 (b) Nach Gleichung (2.9) berechnete Eigenwerte im Energieraum.  
 Nach einer Abbildung aus [5]

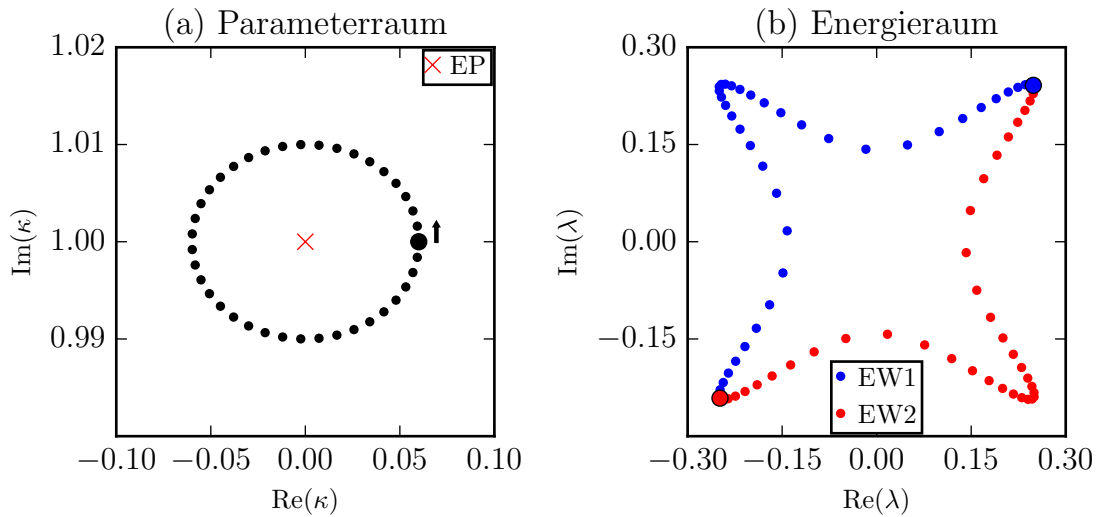


Abbildung 2.3.: (a) Elliptische Umrundung des exceptionellen Punktes an der Stelle  $\kappa = i$  mit  $\kappa(\varphi) = i + \rho_1 \cos(\varphi) + i\rho_2 \sin(\varphi)$  im Parameterraum.  
 (b) Nach Gleichung (2.9) berechnete Eigenwerte im Energieraum.  
 Nach einer Abbildung aus [1]



## 3. Das Matrixmodell

Das in Abschnitt 2.1 erwähnte und in [1] durchgeführte Verfahren für die Berechnung der Umkreisung eines exzeptionellen Punktes ist numerisch sehr aufwendig, weshalb versucht wird, ein einfacheres Modell zu finden. Da ein exzeptioneller Punkt aus zwei bei einer Umkreisung vertauschenden Zuständen besteht, kann das System am einfachsten durch ein zweidimensionales Matrixmodell beschrieben werden. Hierbei werden jedoch nur die beiden vertauschenden Zustände betrachtet, alle anderen Kopplungen werden vernachlässigt. Das Matrixmodell soll verwendet werden, um eine dynamische Umkreisung exzeptioneller Punkte zu untersuchen. In diesem Kapitel wird es entwickelt und seine Anwendung beschrieben.

### 3.1. Motivation des Matrixmodells

Für den statischen Fall des Wasserstoffatoms in parallelen Feldern lassen sich folgende Größen berechnen, welche die Eigenwerte  $E_1$  und  $E_2$  vollständig beschreiben:

$$\kappa \equiv E_1 + E_2 = \text{tr}(\underline{\underline{H}}) = A + B(\gamma - \gamma_{EP}) + C(f - f_{EP}) \quad , \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} \eta \equiv (E_1 - E_2)^2 = \text{tr}^2(\underline{\underline{H}}) - 4 \det(\underline{\underline{H}}) = D + E(\gamma - \gamma_{EP}) + F(f - f_{EP}) \\ + G(\gamma - \gamma_{EP})^2 + H(\gamma - \gamma_{EP})(f - f_{EP}) + I(f - f_{EP})^2 \end{aligned} \quad (3.2)$$

Hierbei sind  $A$  bis  $I$  komplexe Entwicklungskoeffizienten. Dabei wird in quadratischer Ordnung um den exzeptionellen Punkt entwickelt. Die Entwicklungskoeffizienten können bei der Suche nach exzeptionellen Punkten mit dem vollständigen Operator mithilfe der Oktagonmethode nach [6] bestimmt werden. Mit diesen Koeffizienten soll aus  $\kappa$  und  $\eta$  die  $2 \times 2$  Matrix  $\underline{\underline{H}}$  konstruiert werden, welche in dieser Arbeit dann als Hamilton-Operator des Problems verwendet wird. Das ist nötig, da mit  $\kappa$  und  $\eta$  zwar der stationäre Fall vollständig beschrieben werden kann, für die dynamische Beschreibung jedoch der gesamte Operator benötigt wird. Die Matrix soll eine quadratische Entwicklung in  $\gamma$  und  $f$  sein. Da  $\kappa$  und  $\eta$  aus Polynomen in  $\gamma$  und  $f$  bestehen, darf die Matrix auch nur aus Polynomen in  $\kappa$  und  $\eta$  aufgebaut werden.

## 3.2. Konstruktion der Matrix

Die zur Berechnung verwendete Matrix ist nicht eindeutig festgelegt, da nur die komplexe Symmetrie, die Spur  $\kappa = E_1 + E_2 = \text{tr}(\underline{H})$  und die quadratische Differenz der Eigenwerte  $\eta = (E_1 - E_2)^2 = \text{tr}^2(\underline{H}) - 4 \det(\underline{H})$  festgelegt sind. Es muss noch ein freier Parameter festgelegt werden. Komplexe Symmetrie bedeutet hierbei, dass die Matrix mit ihrer transponierten übereinstimmt, ihre Einträge jedoch komplex sind

$$\underline{H} = \underline{H}^T \quad (3.3a)$$

$$\Rightarrow \underline{H} = \begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix} ; \quad a, b, d \in \mathbb{C} \quad . \quad (3.3b)$$

Die Bedingung kommt daher, dass der Hamilton-Operator des vollständigen Problems ebenfalls komplex symmetrisch ist. Im Folgenden wird die Herleitung der verwendeten Matrix gezeigt. Der allgemeine Ansatz lautet

$$\underline{H} = \begin{pmatrix} g_1(\kappa, \eta, c) & f_2(\kappa, \eta, c) \\ f_2(\kappa, \eta, c) & g_2(\kappa, \eta, c) \end{pmatrix} \quad . \quad (3.4)$$

Daraus berechnen sich

$$\text{tr}(\underline{H}) = \kappa = g_1 + g_2 \quad \Rightarrow \quad g_2 = \kappa - g_1 \quad (3.5)$$

$$\det \underline{H} = g_1 g_2 - f_2^2 \quad (3.6)$$

$$\Rightarrow \eta = \kappa^2 - 4g_1 g_2 + 4f_2^2 = \kappa^2 - 4\kappa g_1 + 4g_1^2 + 4f_2^2 = 4 \left( \frac{\kappa}{2} - g_1 \right)^2 + 4f_2^2 \quad . \quad (3.7)$$

Da  $\eta$  von  $\kappa$  unabhängig ist, muss  $g_1$  so gewählt werden, dass diese Abhängigkeit verschwindet, außerdem darf  $f_2$  nicht von  $\kappa$  abhängen, also

$$g_1 = \frac{\kappa}{2} + f_1(\eta, c) \quad \Rightarrow \quad g_2 = \frac{\kappa}{2} - f_1(\eta, c) \quad (3.8a)$$

$$f_2 = f_2(\eta, c) \quad , \quad (3.8b)$$

woraus für die Matrix folgt

$$\underline{H} = \begin{pmatrix} \frac{\kappa}{2} + f_1(\eta, c) & f_2(\eta, c) \\ f_2(\eta, c) & \frac{\kappa}{2} - f_1(\eta, c) \end{pmatrix} \quad . \quad (3.9)$$

Damit gilt

$$\eta = \kappa^2 - \kappa^2 + 4f_1^2 + 4f_2^2 = 4(f_1^2 + f_2^2) \quad . \quad (3.10)$$

Da die Matrix aus einer Entwicklung besteht, ist der Ansatz für  $f_i$  ein Polynom ersten Grades in  $\eta$

$$f_i = a_i + b_i \eta \quad (3.11)$$

Einsetzen von Gleichung (3.11) in Gleichung (3.10) liefert

$$\begin{aligned} \eta &= 4(a_1^2 + b_1^2 \eta^2 + 2a_1 b_1 \eta + a_2^2 + b_2^2 \eta^2 + 2a_2 b_2 \eta) \\ &= 4(b_1^2 + b_2^2) \eta^2 + 8(a_1 b_1 + a_2 b_2) \eta + 4(a_1^2 + a_2^2) \quad . \end{aligned} \quad (3.12)$$

Ein Koeffizientenvergleich liefert

$$a_1^2 + a_2^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad a_2 = \pm i a_1 \quad (3.13a)$$

$$b_1^2 + b_2^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad b_2 = \pm i b_1 \quad (3.13b)$$

$$8(a_1 b_1 + a_2 b_2) = 1 \quad = 8(a_1 b_1 - (\pm a_1)(\pm b_1)) \quad (3.13c)$$

Um die letzte Gleichung (3.13c) erfüllen zu können, müssen für  $a_2$  und  $b_2$  unterschiedliche Vorzeichen gewählt werden

$$a_2 = \pm i a_1 \quad (3.14a)$$

$$b_2 = \mp i b_1 \quad (3.14b)$$

$$16a_1 b_1 = 1 \quad \Rightarrow \quad b_1 = \frac{1}{16a_1} \quad (3.14c)$$

Wird nun  $c = 4a_1$  gewählt, folgt daraus

$$f_1 = \frac{1}{4} \left( c + \frac{\eta}{c} \right) \quad (3.15)$$

und

$$f_2 = \pm \frac{i}{4} \left( c - \frac{\eta}{c} \right) \quad (3.16)$$

und damit die Matrix

$$\underline{\underline{H}} = \begin{pmatrix} \frac{\kappa}{2} + \frac{1}{4} \left( c + \frac{\eta}{c} \right) & \pm \frac{i}{4} \left( c - \frac{\eta}{c} \right) \\ \pm \frac{i}{4} \left( c - \frac{\eta}{c} \right) & \frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4} \left( c + \frac{\eta}{c} \right) \end{pmatrix} \quad . \quad (3.17)$$

Der noch freie und unbekannt Parameter  $c$  wird in Abschnitt 4.4 näher untersucht und festgelegt.

### 3.3. Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix

Für die Rechnungen mit der Matrix wird im Folgenden das obere Vorzeichen von Gleichung (3.17) gewählt

$$\underline{\underline{H}} = \begin{pmatrix} \frac{\kappa}{2} + \frac{1}{4} \left( c + \frac{\eta}{c} \right) & \frac{i}{4} \left( c - \frac{\eta}{c} \right) \\ \frac{i}{4} \left( c - \frac{\eta}{c} \right) & \frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4} \left( c + \frac{\eta}{c} \right) \end{pmatrix} . \quad (3.18)$$

Die Eigenwerte dieser Matrix sind

$$E_1 = \frac{1}{2} (\kappa + \sqrt{\eta}) \quad , \quad (3.19a)$$

$$E_2 = \frac{1}{2} (\kappa - \sqrt{\eta}) \quad (3.19b)$$

und die unnormierten Eigenvektoren lauten

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} -\frac{i(c+\sqrt{\eta})}{c-\sqrt{\eta}} \\ 1 \end{pmatrix} , \quad (3.20a)$$

$$\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{i(c-\sqrt{\eta})}{c+\sqrt{\eta}} \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (3.20b)$$

Es ist bei den späteren Berechnungen vorteilhaft, dass sich diese analytisch angeben lassen und nicht komplett numerisch bestimmt werden müssen.

### 3.4. Umkreisung eines exceptionellen Punktes

Der exzeptionelle Punkt soll im Parameterraum elliptisch umrundet werden. Dies soll erst stationär und anschließend auf der selben Ellipse dynamisch erfolgen. Dabei ist die dynamische Umkreisung die tatsächliche physikalische Umkreisung, die Felder werden kontinuierlich und zeitabhängig geändert. Im stationären Fall wird diese Zeitabhängigkeit nicht betrachtet, es wird für jeden Punkt auf der betrachteten Ellipse das Verhalten gezeigt, wenn der Zustand auf diesen Punkt eingestellt und nicht mehr verändert wird.

#### 3.4.1. Stationäre Umkreisung

Durch eine Parametrisierung der Felder der Form

$$\gamma(\varphi) = \gamma_{\text{EP}} (1 + r_\gamma \cos(\varphi + \varphi_0)) \quad , \quad (3.21)$$

$$f(\varphi) = f_{\text{EP}} (1 + r_f \sin(\varphi + \varphi_0)) \quad (3.22)$$

wird der exzeptionelle Punkt für  $\varphi \in [0, 2\pi]$  einmal stationär elliptisch umlaufen. Das bedeutet, dass auf den Punkten der Ellipse die stationäre Schrödingergleichung (3.27)



gelöst werden muss, die in Abschnitt 3.5 beschrieben wird. Dies ist keine echte, physikalische Umrundung, da die Zeitabhängigkeit nicht betrachtet wird. Für jeden dieser Punkte wird das Verhalten beschrieben, wenn der Punkt die ganze Zeit über nicht geändert wird, die Zeitabhängigkeit der Zustände wird mit Gleichung (2.6) beschrieben. Eine vollständige Umrundung führt nach Abschnitt 2.3 zum Vertauschen der Energieeigenwerte. Die Energieeigenwerte sind anfangs nicht sortiert. Um ein falsches, also nur durch die falsche Sortierung bedingtes Vertauschen der Zustände zu verhindern, werden die Eigenwerte mit ihren Wellenfunktionen, ausgehend vom einem festgelegten ersten Eigenwert, iterativ nach dem minimalen Abstand zum vorherigen Eigenwert sortiert und farblich gekennzeichnet. Dabei müssen die  $\varphi$ -Werte klein genug gewählt werden, dass die Sortierung möglich ist. Bei der Berechnung der Energieeigenwerte  $E_i(\varphi)$  werden auch die zugehörigen Wellenfunktionen  $|\psi_i(\varphi)\rangle$  berechnet, da sie in der selben Weise wie die Energieeigenwerte sortiert werden müssen und später für die dynamische Rechnung benötigt werden. Sie bilden die mitgeführte Basis, auf die der dynamische Wellenvektor später projiziert wird. Die mitgeführte Basis beschreibt den stationären Zustand ohne Zerfall. Es ist zu beachten dass diese Basis mit den Eigenwerten zusammen vertauscht, da diese voneinander abhängig sind.

### 3.4.2. Dynamische Umkreisung

Im nächsten Schritt wird der exzeptionelle Punkt analog zum stationären Fall zeitabhängig umrundet. Dies ist die eigentliche, physikalisch messbare Umkreisung. Dazu wird bei einer gegebenen Umrundungsdauer  $T$  die Transformation

$$\varphi \rightarrow \varphi(t) = \frac{2\pi}{T} t \quad (3.23)$$

mit  $t \in [0, T]$  vorgenommen. Damit werden auch die Felder von der Zeit abhängig und es ergeben sich die Parametrisierungen

$$\gamma(t) = \gamma_{\text{EP}} \left( 1 + r_\gamma \cos \left( \frac{2\pi}{T} t + \varphi_0 \right) \right) \quad (3.24)$$

und

$$f(t) = f_{\text{EP}} \left( 1 + r_f \sin \left( \frac{2\pi}{T} t + \varphi_0 \right) \right) , \quad (3.25)$$

wodurch auch der Hamilton-Operator von der Zeit abhängt:

$$\underline{H} \rightarrow \underline{H}(t) . \quad (3.26)$$

Erst damit kann die Umkreisung physikalisch korrekt beschrieben werden.

### 3.5. Die stationäre Schrödingergleichung

Die stationäre Schrödingergleichung lautet

$$E_i |\psi_i\rangle = \underline{\underline{H}} |\psi_i\rangle \quad . \quad (3.27)$$

Der Hamilton-Operator  $\underline{\underline{H}}$  darf hier nicht von der Zeit abhängen. Da der Hamiltonian in diesem Fall der zweidimensionalen Matrix entspricht, sind die Eigenenergien  $E_i$  die Eigenwerte der Matrix und die Wellenfunktionen  $|\psi_i\rangle$  die normierten Eigenvektoren

$$|\psi_1\rangle = \frac{\vec{v}_1}{|\vec{v}_1|} \quad , \quad (3.28a)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{\vec{v}_2}{|\vec{v}_2|} \quad . \quad (3.28b)$$

Aufgrund der komplexen Rotation dürfen bei der Berechnung des Skalarproduktes nur die intrinsischen komplexen Anteile der Wellenfunktion komplex konjugiert werden. Es wird daher nicht mit dem hermiteschen Skalarprodukt, sondern mit dem c-Produkt nach Moiseyev [7] gerechnet. Dies ist ein komplexes Skalarprodukt ohne komplexe Konjugation, für das gilt

$$(\psi_a|\psi_b) = \langle \psi_a^* | \psi_b \rangle \quad . \quad (3.29)$$

Da der Hamiltonian symmetrisch ist, bilden die Wellenfunktionen somit eine orthonormale Basis

$$(\psi_a|\psi_b) = \delta_{ab} \quad , \quad (3.30)$$

wobei  $\delta_{ab}$  das Kronecker-Delta für zwei Wellenfunktionen  $\psi_a$  und  $\psi_b$  bezeichnet

$$\delta_{ab} = \begin{cases} 1, & a = b \\ 0, & a \neq b \end{cases} \quad . \quad (3.31)$$

### 3.6. Die dynamische Schrödingergleichung

Während im stationären Fall die Zeitabhängigkeit nach Gleichung (2.6) nur durch den exponentiellen Zerfall gegeben ist, hängt bei einer zeitabhängigen Umrundung des exceptionellen Punktes auch der Hamiltonian von der Zeit ab. Die stationäre Schrödingergleichung reicht zur Beschreibung daher nicht mehr aus. Es gilt die dynamische Schrödingergleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \underline{\underline{H}}(t) |\psi\rangle \quad (3.32)$$

für den rechtsseitigen Vektor. Für den linksseitigen Vektor, welcher die umgekehrte Zeitentwicklung beschreibt, gilt

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | = \langle \psi | \underline{H}(t) \quad . \quad (3.33)$$

Hierbei sind  $|\psi\rangle$  und  $\langle \psi |$  ebenfalls zweidimensionale Vektoren.

Um bei gegebener Anfangsbesetzung die Änderung der Population betrachten zu können wird der dynamische Wellenvektor auf die mitgeführte Basis projiziert

$$|\psi\rangle = (\psi_1|\psi\rangle) |\psi_1\rangle + (\psi_2|\psi\rangle) |\psi_2\rangle = \alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle \quad , \quad (3.34)$$

$$\langle \psi | = (\psi_1| \langle \psi | \psi_1\rangle + \psi_2| \langle \psi | \psi_2\rangle) = \alpha_1^\dagger \langle \psi_1| + \alpha_2^\dagger \langle \psi_2| \quad . \quad (3.35)$$

Aus  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  und der Orthonormalitätsrelation aus Gleichung (3.30) folgt damit außerdem

$$\alpha_1 \alpha_1^\dagger + \alpha_2 \alpha_2^\dagger = 1 \quad . \quad (3.36)$$

Gleichung (3.36) lässt sich zur Überprüfung der numerischen Genauigkeit der Rechnungen nutzen. Ist sie nicht mehr erfüllt, kann das nur an Problemen der Numerik liegen. Dies wird auch in Abschnitt 4.3 diskutiert.

## 3.7. Die Untersuchung der Besetzung

Das eigentliche Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung der Besetzung der Zustände bei einer dynamischen Umkreisung eines exzeptionellen Punktes. Dabei werden zwei Fragestellungen untersucht:

1. Wie sieht die relative Besetzung aus?
2. Wie verhält es sich mit der absoluten Besetzung?

Die absolute Besetzung bezeichnet die übrig gebliebene, noch nicht zerfallene Population in ihrem jeweiligen Zustand. Die relative Besetzung beschreibt die prozentuale Verteilung der gesamten übrigen Population auf die beiden Zustände, dabei wird der Zerfall herausgerechnet. Um die Besetzung zu berechnen, wird die Wellenfunktion aus der dynamischen Schrödingergleichung (3.32) auf die Lösung des stationären Falles, also auf die mitgeführte Basis projiziert. Hierzu wird zuerst

$$\alpha_i(t) = (\psi_i|\varphi(t))|\psi(t) \quad (3.37)$$

berechnet und anschließend daraus das Betragsquadrat

$$|\alpha_i(t)|^2 = |(\psi_i|\varphi(t))|\psi(t)|^2 \quad . \quad (3.38)$$

### 3. Das Matrixmodell

---

Dieses gibt an, welcher Anteil der Population noch im ursprünglichen Zustand verblieben ist bzw. den Zustand gewechselt hat.

Am Anfang soll immer einer der beiden Zustände voll besetzt sein, was auch für beide Zustände untersucht werden soll. Dafür werden in zwei Rechnungen die stationären Eigenvektoren  $|\psi_i(\varphi = 0)\rangle$  für  $i = 1, 2$  als Startvektor  $|\psi(t = 0)\rangle$  verwendet.

Da sich in der mitgeführten Basis die Zustände nach einer Umkreisung komplett vertauschen, vertauschen die dynamischen Zustände dann, wenn sie im ursprünglichen Zustand der mitgeführten Basis verbleiben.

Ist am Anfang der erste Zustand vollständig besetzt gilt mathematisch  $|\alpha_1(t = 0)|^2 = 1$  und  $|\alpha_2(t = 0)|^2 = 0$ . Die Zustände vertauschen dann, wenn nach einer vollständigen Umkreisung  $|\alpha_1(t = T)|^2 = 0$  und  $|\alpha_2(t = T)|^2 = 1$  gilt. Ab  $|\alpha_1|^2 > |\alpha_2|^2$  ist die Population im ersten Zustand höher als im zweiten.

Für die relative Besetzung wird der Zerfall herausgerechnet. Dazu werden die  $|\alpha_i|^2$  normiert zu

$$|\alpha_{\text{norm},i}(t)|^2 = \frac{|\alpha_i(t)|^2}{|\alpha_1(t)|^2 + |\alpha_2(t)|^2} \quad (3.39)$$

womit gilt

$$|\alpha_{\text{norm},1}(t)|^2 + |\alpha_{\text{norm},2}(t)|^2 = 1 \quad . \quad (3.40)$$

Durch die Normierung werden Vertauschungen besser sichtbar. Es ist prozentual erkennbar welcher verbliebene Anteil sich in welchem Zustand befindet.

Für die Frage nach der absoluten Besetzung wird untersucht, unter welchen Bedingungen die Besetzung des ersten Zustandes nach einer vollständigen Umrundung  $|\alpha_{\text{norm},i}(T)|^2$  maximiert werden kann. Dazu werden in den Gleichungen (3.24) und (3.25) die Umlaufdauer  $T$ , die relativen Radien  $r_f$  und  $r_\gamma$  und der Startwinkel  $\varphi_0$  variiert.

## 4. Ergebnisse und Diskussion

Dieses Kapitel widmet sich der Beantwortung der in Abschnitt 3.7 gestellten Fragen. Dazu wird zuerst die stationäre Umkreisung untersucht, im Anschluss werden die zeitabhängigen Umkreisungen betrachtet. Dabei werden die Umlaufdauern, der Startwinkel, die Radien und der freie Parameter  $c$  variiert. Diese Untersuchungen werden außerdem mit den Lösungen des vollständigen Problems verglichen.

### 4.1. Wahl des exzeptionellen Punktes

Im Folgenden wird ein exzeptioneller Punkt umrundet, welcher sich im Parameterraum bei  $\gamma_{EP} = 1,445263 \cdot 10^{-2}$  und  $f_{EP} = 3,176736 \cdot 10^{-4}$  befindet. Seine Energie liegt bei  $-2.703665 \cdot 10^{-2} - 4.171979 \cdot 10^{-4}i$ . Die in der Matrix verwendeten Entwicklungskoeffizienten wurden mithilfe der Oktagonmethode nach [6] von Lukas Oberreiter im Zuge einer Masterarbeit [8] berechnet und zur Verfügung gestellt. Von ihm sind auch die Vergleichsrechnungen aus dem vollständigen Modell. Dabei ist zu Beachten, dass im vollständigen Modell Nebenresonanzen mit berücksichtigt werden, im Matrixmodell nicht.

### 4.2. Stationäre Umkreisung

Abbildung 4.1 zeigt den Parameterraum ( $\gamma$  und  $f$ ) und den Energieraum ( $\text{Re}(E)$ ,  $\text{Im}(E)$ ) für eine stationäre Umkreisung mit den Radien  $r_f = 10^{-4}$  und  $r_\gamma = 10^{-4}$ . Es ist das Vertauschungsverhalten der Punkte und die Sternform der Trajektorie zu erkennen, die auch in Abschnitt 2.3 besprochen wurde. Bei einer Umkreisung mit einem größeren Radius verschwindet die Sternform, was in Abbildung 4.2 mit den Radien  $r_f = 10^{-2}$  und  $r_\gamma = 10^{-2}$  zu sehen ist.

Im stationären Fall stimmt das Matrixmodell mit der vollständigen Rechnung sehr gut überein, wie schon in [1] gezeigt wurde. Im Folgenden wird nun die zeitabhängige Umkreisung untersucht.

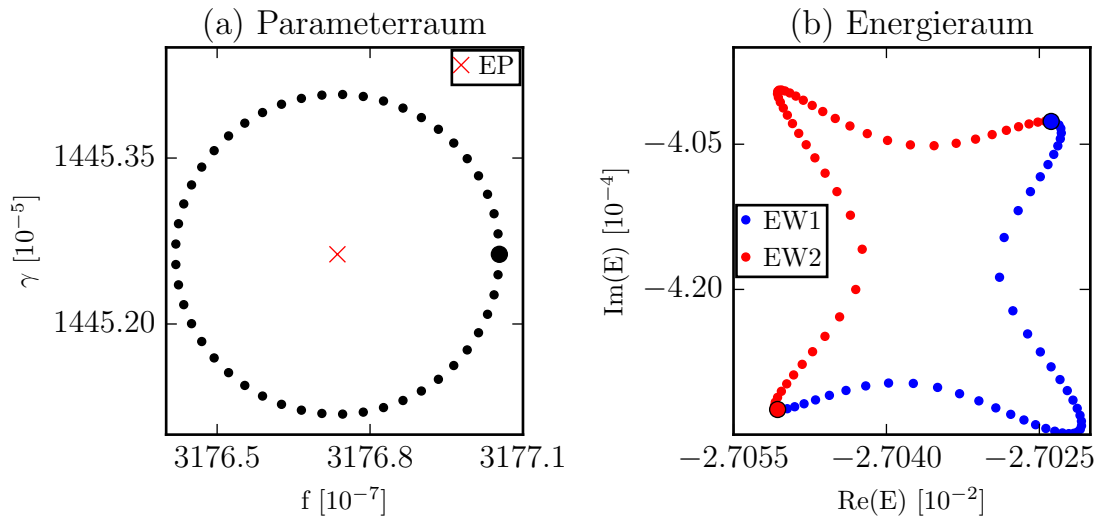


Abbildung 4.1.: (a) Elliptische Umkreisung des exzeptionellen Punktes mit  $r_f = 10^{-4}$  und  $r_\gamma = 10^{-4}$  in 50 Schritten dargestellt im Parameterraum. (b) Berechnete Energieeigenwerte, es ist das für kleine Radien typische sternförmige Aussehen und das Vertauschungsverhalten zu erkennen.

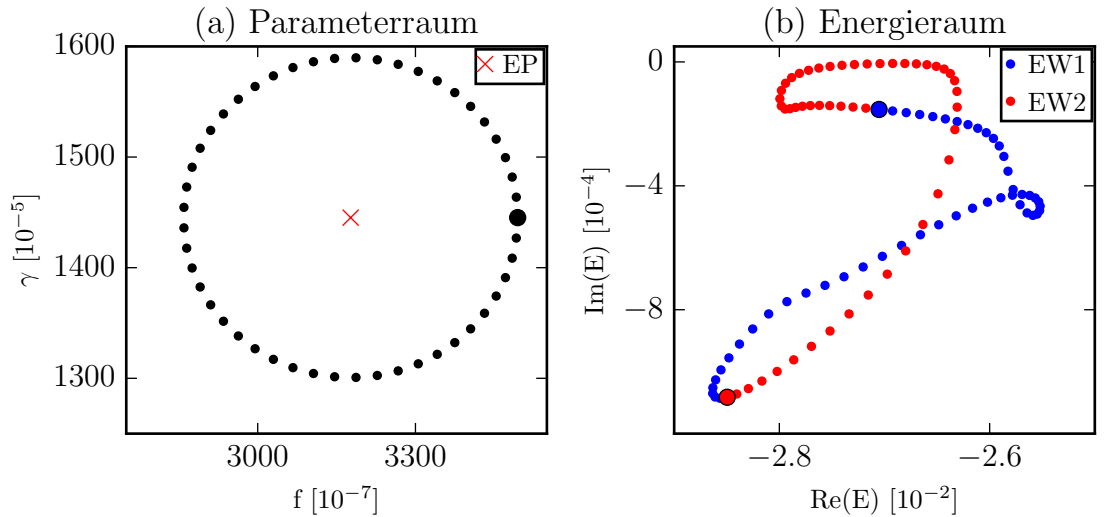


Abbildung 4.2.: (a) Elliptische Umkreisung des exzeptionellen Punktes mit  $r_f = 10^{-2}$  und  $r_\gamma = 10^{-2}$  in 50 Schritten dargestellt im Parameterraum. (b) Berechnete Energieeigenwerte, bei solchen großen Radien weicht die Trajektorie deutlich vom sternförmigen Aussehen ab, das Vertauschungsverhalten ist wieder zu erkennen.

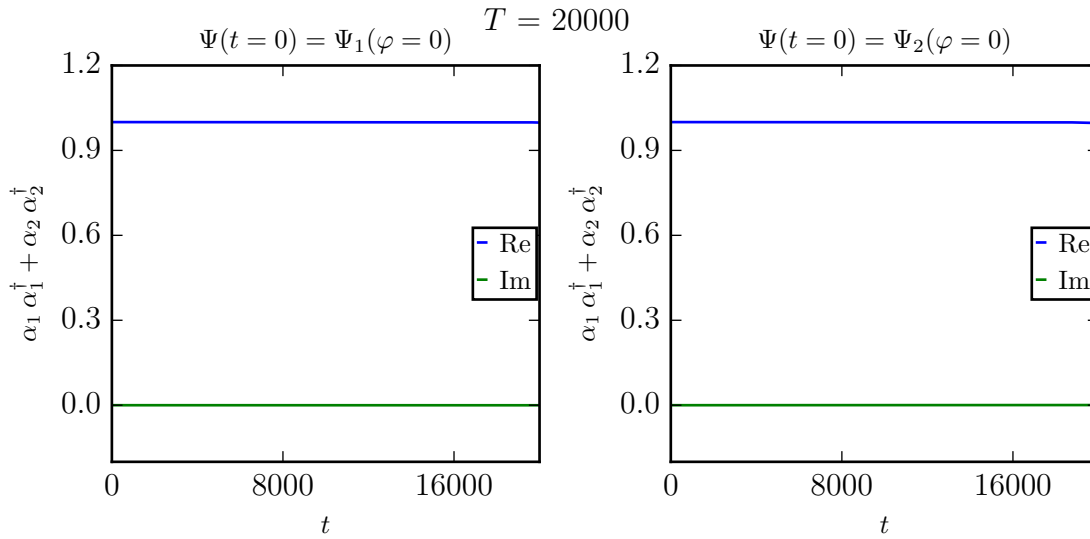


Abbildung 4.3.: Realteil (blau) und Imaginärteil (grün) von  $\alpha_1 \alpha_1^\dagger + \alpha_2 \alpha_2^\dagger$  mit Startvektor  $\Psi_1$ (links) bzw.  $\Psi_2$ (rechts) für eine Umlaufdauer von  $T = 20000$ . Der Realteil bleibt bei eins und der Imaginärteil bei null, die Numerik macht keine Probleme.

### 4.3. Überprüfung der numerischen Genauigkeit

Die Schrödingergleichungen (3.32) und (3.33) werden mithilfe des Runge-Kutta-Verfahrens berechnet, welches in Anhang B beschrieben ist. Im Folgenden werden, wenn nicht explizit anders beschrieben,  $r_f = 10^{-3}$ ,  $r_\gamma = 10^{-3}$  und  $\varphi_0 = 0$  gewählt.

Um die numerische Genauigkeit dieses Verfahrens zu überprüfen, wird nach Gleichung (3.36)  $\alpha_1 \alpha_1^\dagger + \alpha_2 \alpha_2^\dagger$  berechnet. Wenn der Realteil davon eins und der Imaginärteil null ist, ist die Numerik genau, bei größeren Abweichungen reicht sie nicht mehr aus. In Abbildung 4.3 sind bei einer Umkreisung für  $T = 20000$  der Realteil und der Imaginärteil für eine vollständige Umkreisung gegen die Zeit aufgetragen. Es ist gut zu erkennen, dass die Bedingung (3.36) erfüllt ist. Bei größeren Umlaufdauern wird das Verfahren bei großen Zeiten  $t$  zu ungenau, da durch den Zerfall die Vektoreinträge sehr klein werden, was Probleme in der Genauigkeit der numerischen Berechnung verursacht. Dies ist in Abbildung 4.4 für eine Umlaufdauer von  $T = 50000$  zu sehen. Hier weichen die Werte nach einer vollen Umkreisung extrem vom Optimum ab und sind unbrauchbar.

### 4.4. Abhängigkeit der Dynamik vom Parameter $c$

Während den Rechnungen wurde der freie, komplexe Parameter  $c$  für verschiedene Größenordnungen variiert, dabei jedoch innerhalb einer Rechnung konstant gehalten.

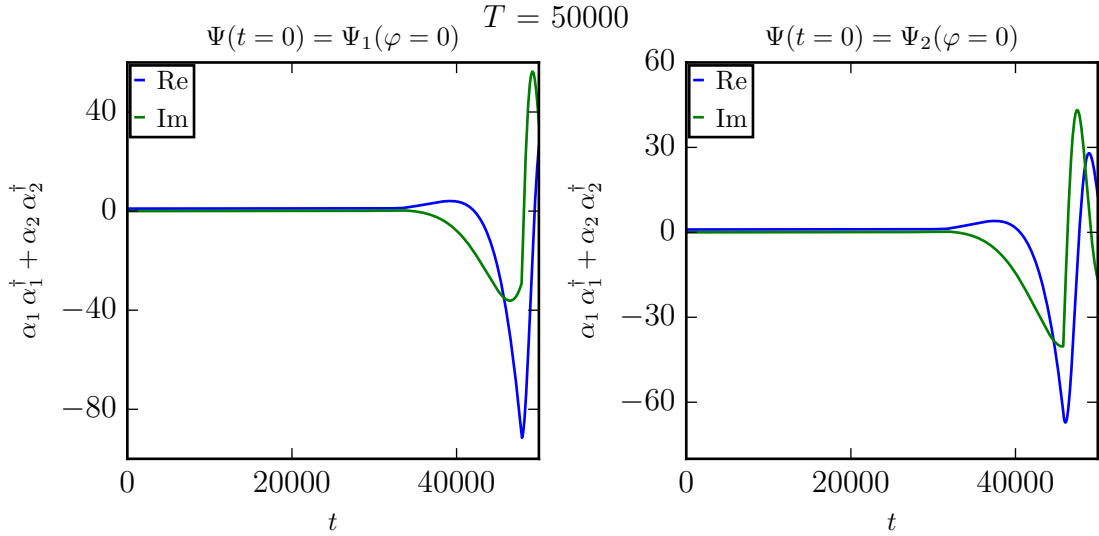


Abbildung 4.4.: Realteil (blau) und Imaginärteil (grün) von  $\alpha_1 \alpha_1^\dagger + \alpha_2 \alpha_2^\dagger$  mit Startvektor  $\Psi_1$ (links) bzw.  $\Psi_2$ (rechts) für eine Umlaufdauer von  $T = 50000$ . Sowohl der Realteil als auch der Imaginärteil beginnen deutlich abzuweichen, die Numerik ist nicht mehr genau genug.

Dabei ist zu beobachten, dass  $c$  über viele Größenordnungen beliebig gewählt werden kann. Bei kleinen Umlaufdauern ist keine Abweichung zu sehen, bei größeren ist die Numerik wegen dem starken Zerfall sensibler, da die Populationen so klein werden, dass es zu Auslöschungen kommt. Dabei werden bei der Addition und Subtraktion von Zahlen sehr unterschiedlicher Größenordnungen die hinteren Nachkommastellen abgeschnitten. Dieser Effekt wird bei größeren  $c$ -Werten verstärkt und führt somit zu Abweichungen vom wirklichen Ergebnis. In Abbildung 4.5 sind die Endpopulationen für eine Umlaufdauer von  $T = 10000$  für  $c$ -Werte zwischen  $10^{-7}$  und  $10^4$  eingetragen. Das Ergebnis ist über viele Größenordnungen hinweg unabhängig von  $c$ , erst ab  $c \approx 10^3$  sind die Abweichungen wirklich erkennbar. Da bei diesen Werten auch Gleichung (3.36) nicht mehr erfüllt ist, sind diese Abweichungen numerisch bedingt. Dieses Verhalten gilt nicht nur für die Endpopulation, sondern während des gesamten Umlaufes. Dies ist in Abbildung 4.6 zu sehen, wo die Ergebnisse für  $|\alpha_{\text{norm},i}(t)|^2$  des kompletten Umlaufes für  $c$ -Werte zwischen  $10^{-7}$  und  $10^4$  übereinander dargestellt sind. Erst bei großen  $c$ -Werten weichen die Linien voneinander ab, deshalb sind die Kurven breiter als gewöhnlich.

Um das Problem der Auslöschung numerisch möglichst gering zu halten, wird in allen weiteren Rechnungen  $c = \sqrt{\eta_0}$  mit  $\eta_0 = \eta(\varphi = 0)$  gewählt, da in der Matrix in Gleichung (3.18) nur  $c$ -Abhängigkeiten der Form  $c \pm \frac{\eta}{c}$  vorkommen. Durch diese Wahl des Parameters liegen  $c$  und  $\frac{\eta}{c}$  in der selben Größenordnung, die Auslöschung ist dadurch am Geringsten.



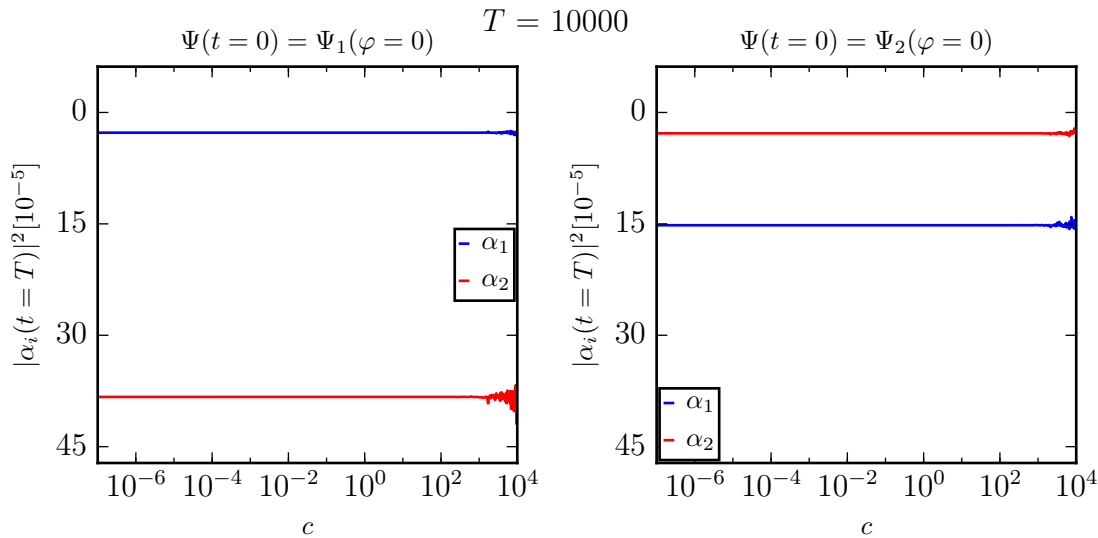


Abbildung 4.5.: Auftragung von  $|\alpha_1(T)|^2$  (blau) und  $|\alpha_2(T)|^2$  (rot) mit Startvektor  $\Psi_1$ (links) bzw.  $\Psi_2$ (rechts) für  $c$ -Werte zwischen  $10^{-7}$  und  $10^4$  nach einer vollständigen Umrundung.

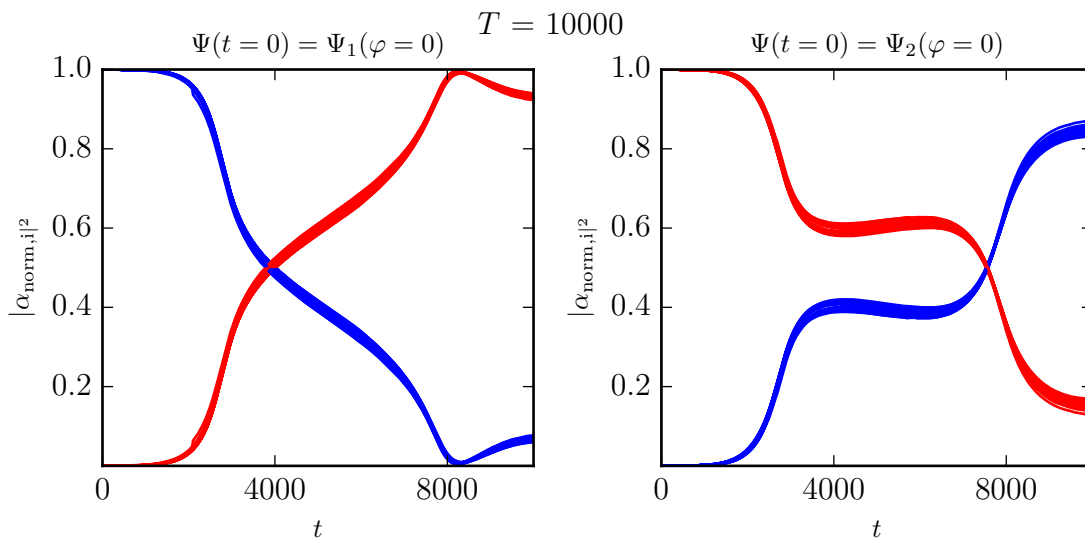


Abbildung 4.6.: Auftragung von  $|\alpha_1(T)|^2$  (blau) und  $|\alpha_2(T)|^2$  (rot) mit Startvektor  $\Psi_1$ (links) bzw.  $\Psi_2$ (rechts) für  $c$ -Werte zwischen  $10^{-7}$  und  $10^4$ . Die Kurven liegen für verschiedene  $c$ -Werte übereinander, es sind erst für große  $c$  Abweichungen zu erkennen, diese verbreitern die Linie.

## 4.5. Schnelle Umkreisung

Wird der exzeptionelle Punkt mit einer Umlaufdauer von  $T = 10$  umrundet, ergeben sich die Abbildungen 4.7 und 4.8. In der halblogarithmisch aufgetragenen Darstellung der unnormierten Zustände  $|\alpha_i(t)|^2$  gegen die Zeit  $t$  in Abbildung 4.7 ist zu erkennen, dass der Zerfall der Zustände für sehr kurze Zeiten noch gering ist. Der exponentielle Zerfall ist in der Abbildung nicht zu sehen. Die Zustände verhalten sich für beide Startbedingungen sehr ähnlich.

Das Verhalten der Zustände ist in der normierten Darstellung in Abbildung 4.8 gut zu beschreiben. Die Anteile der Population in der mitgeführten Basis vertauschen komplett nach einer Umkreisung. Da jedoch die Basis selbst nach einer Umrundung vertauscht, bedeutet das, dass die Population vollständig in ihrem ursprünglichen Zustand verbleibt, ein Vertauschen in der mitgeführten Basis ist keine Vertauschung der Zustände. Bei einer schnellen Umkreisung kommt der Zustand der Änderung nicht hinterher und ändert sich selbst nur geringfügig.

## 4.6. Langsame Umkreisung

Nun wird der exzeptionelle Punkt mit einer Umlaufdauer von  $T = 20000$  umrundet. In Abbildung 4.9, der halblogarithmisch aufgetragenen Darstellung der unnormierten Zustände, ist deutlich der exponentielle Zerfall der Zustände zu sehen. Nach einer Umkreisung sind die Populationen in diesem Fall so gering, dass eine experimentelle Messung kaum mehr möglich ist, die Population hat schon um einen Faktor  $10^6$  abgenommen.

Die normierte Darstellung in Abbildung 4.10 zeigt, dass es zwischen den verschiedenen Anfangsbedingungen deutliche Unterschiede im Verlauf gibt; bei der linken Abbildung ist wieder keine Vertauschung der Zustände zu sehen, nur ein kleiner Teil der Population wechselt den Zustand. In der rechten Abbildung wird der Großteil der Population vertauscht, das Ende der roten Kurve liegt über dem Ende der blauen.

Für noch größere Umlaufzeiten wird diese Vertauschung immer deutlicher. Aufgrund des großen Zerfalles versagt jedoch immer mehr die Numerik, wie schon in Abbildung 4.4 zu sehen ist, da die Zustände aufgrund des Zerfalles nahezu verschwinden. Aus diesem Grund ist eine adiabatische Annäherung in diesem Fall nicht möglich, die rechte Kurve zeigt in der normierten Darstellung aber schon tendenziell das erwartete Verhalten, dass die Zustände für viel größere Umlaufzeiten vollständig der Basis folgen und vertauschen. Als nächstes werden für verschiedene Umlaufdauern die Endpopulationen betrachtet.

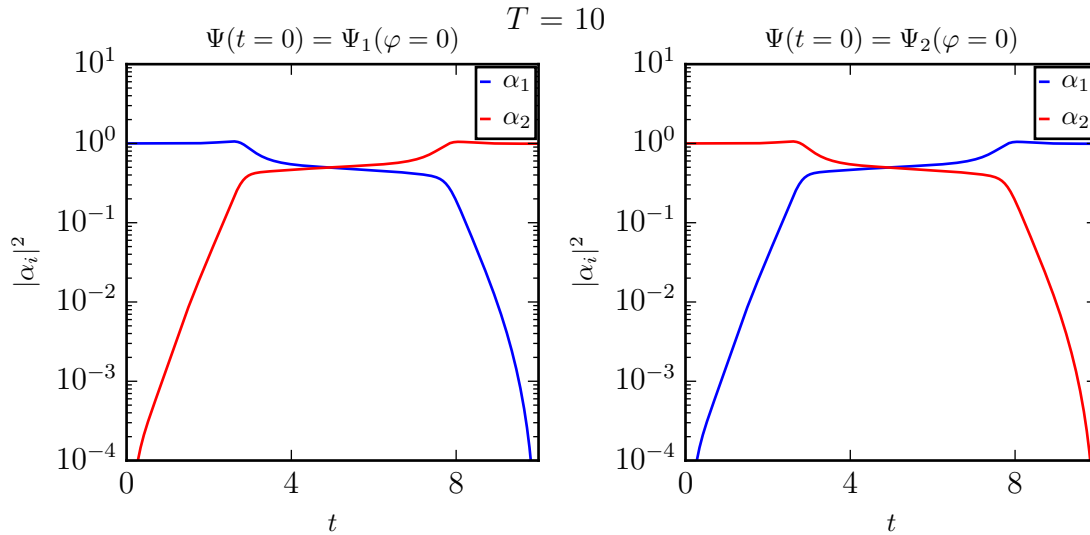


Abbildung 4.7.: Auftragung von  $|\alpha_1(t)|^2$  (blau) und  $|\alpha_2(t)|^2$  (rot) mit Startvektor  $\Psi_1$ (links) bzw.  $\Psi_2$ (rechts) für eine Umlaufdauer von  $T = 10$  mit logarithmischer  $y$ -Achse.

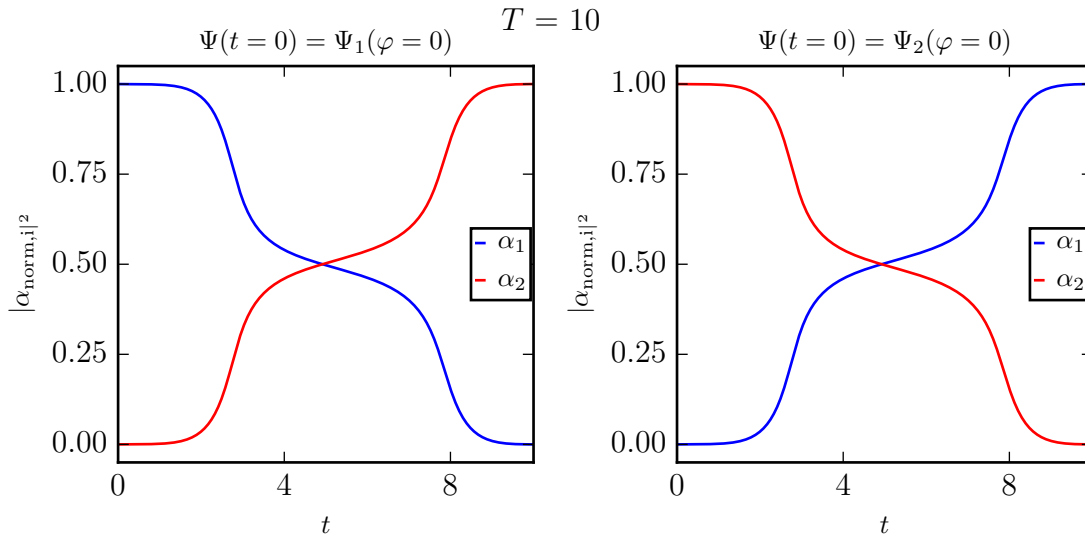


Abbildung 4.8.: Auftragung von  $|\alpha_{\text{norm},1}(t)|^2$  (blau) und  $|\alpha_{\text{norm},2}(t)|^2$  (rot) mit Startvektor  $\Psi_1$ (links) bzw.  $\Psi_2$ (rechts) für eine Umlaufdauer von  $T = 10$ .

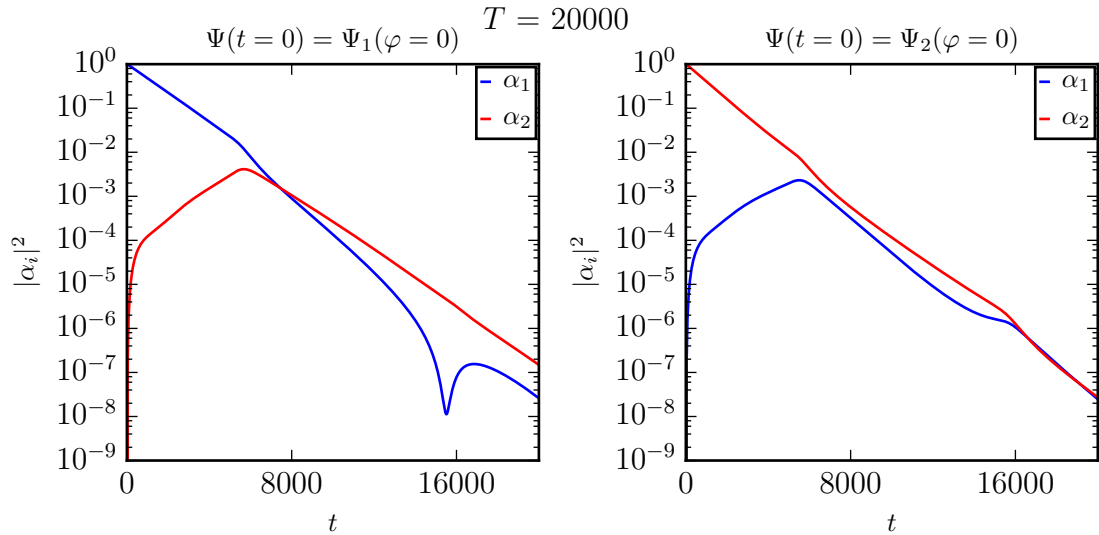


Abbildung 4.9.: Auftragung von  $|\alpha_1(t)|^2$  (blau) und  $|\alpha_2(t)|^2$  (rot) mit Startvektor  $\Psi_1$ (links) bzw.  $\Psi_2$ (rechts) für eine Umlaufdauer von  $T = 20000$  mit logarithmischer  $y$ -Achse.

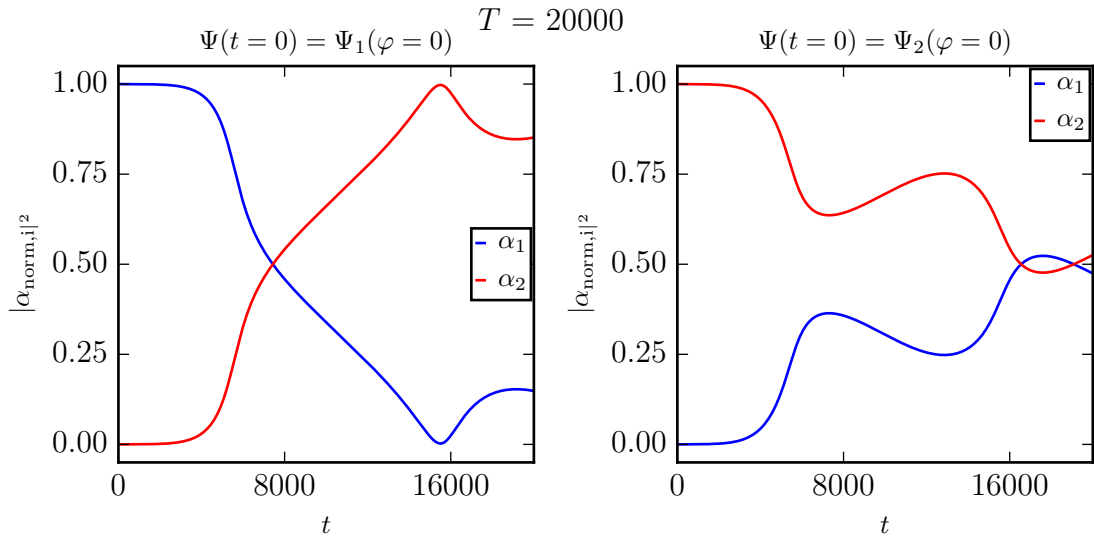


Abbildung 4.10.: Auftragung von  $|\alpha_{\text{norm},1}(t)|^2$  (blau) und  $|\alpha_{\text{norm},2}(t)|^2$  (rot) mit Startvektor  $\Psi_1$ (links) bzw.  $\Psi_2$ (rechts) für eine Umlaufdauer von  $T = 20000$ .

## 4.7. Vergleich der Umkreisungen in Abhängigkeit der Umlaufdauer $T$

Um nun die absolute verbliebene Population nach einer vollständigen Umkreisung in Abhängigkeit der Umlaufdauer  $T$  zu untersuchen, wird die Schar der Schrödingergleichungen für verschiedene  $T$  gelöst und die Endpopulation der beiden Zustände in Abbildung 4.11 gegen die Umlaufdauer eingezeichnet. Zum Vergleich sind noch die von Lukas Oberreiter [8] berechneten Lösungen des vollständigen Problems mit drei Nebenresonanzen in die Abbildung eingetragen. Dabei sind  $|\alpha_1(T)|^2$  in blau für das Matrixmodell und grün für das vollständige Problem,  $|\alpha_2(T)|^2$  in rot für das Matrixmodell und gelb für das vollständige Problem und die Nebenresonanzen in schwarz, türkis und lila eingezeichnet. Das Matrixmodell stimmt hier sehr genau mit der vollständigen Lösung überein.

Wird  $\Psi_2$  als Startvektor verwendet, wie es im rechten Bild zu erkennen ist, schneiden sich die Kurven der Populationen. Ab diesem Punkt beginnen die Zustände zu vertauschen. In beiden Abbildungen ist zu erkennen, dass der Startvektor, der anfangs nicht besetzt war, ein Maximum annimmt. Dieses befindet sich in beiden Fällen bei  $T \approx 2500$ . Eine genauere Bestimmung ist durch eine iterative Suche möglich. Das Maximum ist deshalb interessant, da es experimentell am besten gemessen werden kann. Es entsteht dadurch, dass für größere Umlaufzeiten sowohl das Vertauschen der Zustände als auch der exponentielle Zerfall zunehmen. Während der Zerfall anfangs noch vernachlässigt werden kann, dominiert er das Verhalten schon kurz darauf.

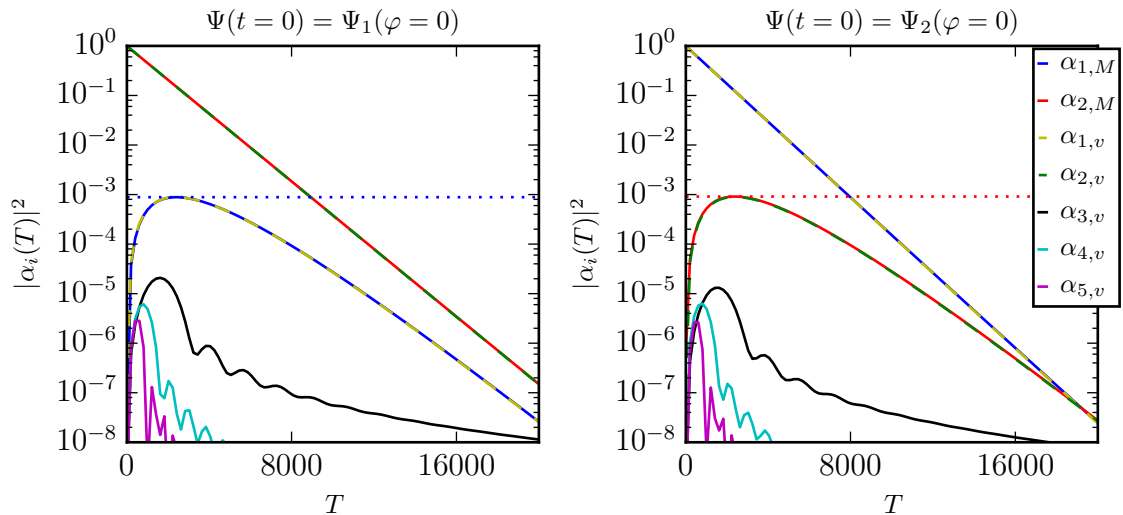


Abbildung 4.11.:  $|\alpha_1(T)|^2$  (blau für das Matrixmodell und gelb für die Lösung des vollständigen Problems) und  $|\alpha_2(T)|^2$  (rot für das Matrixmodell und grün für die Lösung des vollständigen Problems) mit Startvektor  $\Psi_1$  (links) bzw.  $\Psi_2$  (rechts) halblogarithmisch aufgetragen für verschiedene Umlaufzeiten  $T$  nach einer vollständigen Umkreisung. Zusätzlich sind Nebenresonanzen in schwarz, türkis und lila eingezeichnet. Die Ergebnisse des Matrixmodells und die des vollständigen Problems stimmen sehr gut miteinander überein.

Mit beiden Anfangsbedingungen nimmt der am Anfang unbesetzte Zustand bei  $T \approx 2500$  ein Maximum an, welches mit einer gestrichelten Geraden gekennzeichnet ist. Die Ergebnisse des vollständigen Problems stammen von Lukas Oberreiter [8].

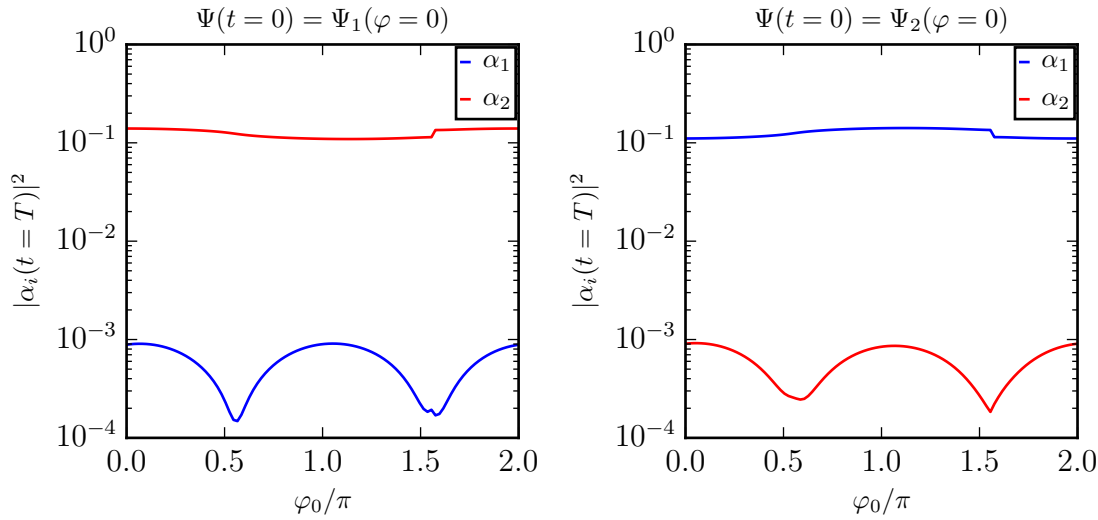


Abbildung 4.12.:  $|\alpha_1(t=T)|^2$  (blau) und  $|\alpha_2(t=T)|^2$  (rot) mit Startvektor  $\Psi_1$ (links) bzw.  $\Psi_2$ (rechts) halblogarithmisch aufgetragen für eine Umlaufzeit von  $T = 2500$  und verschiedene Startwinkel  $\varphi_0$  nach einer vollständigen Umlaufzeit.

## 4.8. Änderung des Startwinkels

Wird nun nicht bei  $\varphi_0 = 0$  gestartet, sondern der Startwinkel variiert, ergibt sich Abbildung 4.12. Es wurde eine Umlaufdauer von  $T = 2500$  gewählt, da für diese Zeit die größte Population zu erkennen war. Wiederum wurde die Population nach einer vollständigen Umlaufzeit aufgetragen.

Ein Vergleich mit Abbildung 4.1 zeigt, dass der anfangs unbesetzte Zustand umso mehr zerfällt, je näher am exzeptionellen Punkt gestartet wird. Eine maximale Population ergibt sich also bei möglichst großer Entfernung zum Punkt, also wenn im Energieraum in den „Ecken des Sterns“ aus Abschnitt 2.3 gestartet wird. Auch für andere Umlaufdauern ist dieses Verhalten sichtbar.

## 4.9. Änderung des Radius der Umkreisung

Nun wird bei einer Umlaufdauer von  $T = 2500$  und einem Startwinkel von  $\varphi_0 = 0$  der Radius verändert, wobei  $6 \cdot 10^{-5} \leq r_f = r_\gamma \leq 10^{-1}$  gewählt wurde. In Abbildung 4.13 ist wieder die verbleibende Population nach einer vollständigen Umkreisung logarithmisch gegen den Radius mit durchgezogenen Linien aufgetragen. Zum Vergleich ist die Lösung des vollständigen Problems mit zusätzlichen Nebenresonanzen mit gestrichelten Linien eingetragen. Dabei sind  $|\alpha_1(T)|^2$  in blau und grün,  $|\alpha_2(T)|^2$  in rot und gelb und die Nebenresonanzen in schwarz, türkis und lila eingezeichnet.

Für beide Anfangsbedingungen ist gut zu erkennen, dass die Besetzung des anfangs besetzten Zustands monoton mit dem Radius ansteigt. Wird der Radius immer größer gewählt, besteht jedoch das Problem, dass das Matrixmodell ungültig wird, da es einerseits nur lokal in der Nähe des exzeptionellen Punkts gilt und andererseits die Umlaufbahn möglicherweise zu nahe an andere Resonanzen kommt, welche ebenfalls das System stören können. Dies ist auch im Vergleich mit der vollständigen Lösung zu erkennen. Das Matrixmodell stimmt bis zu  $r_f = r_\gamma \lesssim 10^{-2}$  mit der vollständigen Lösung überein, erst bei sehr großen Radien kommt es zu Abweichungen.



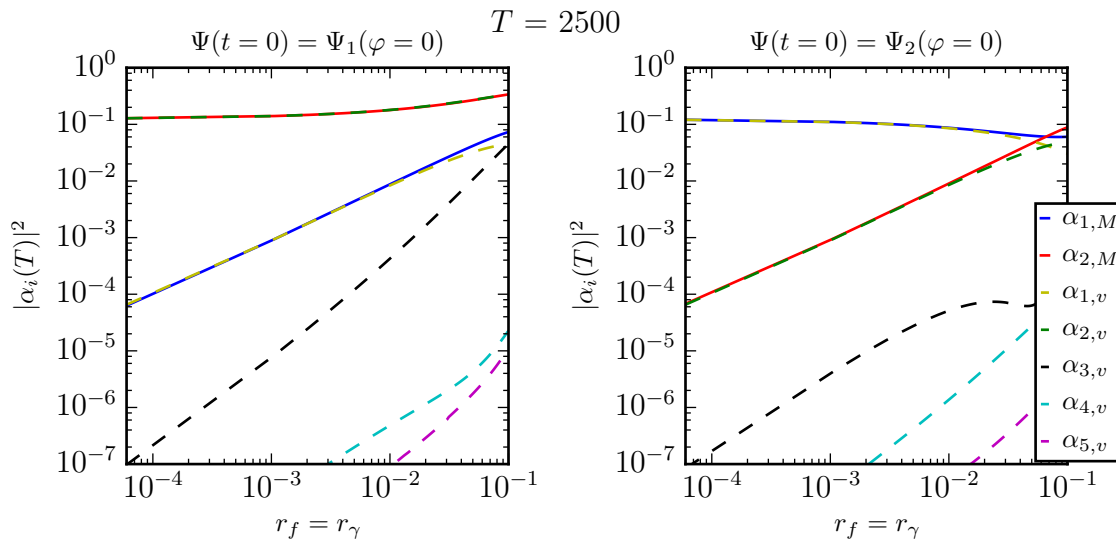


Abbildung 4.13.:  $|\alpha_1(T)|^2$  (blau für das Matrixmodell und gelb für die Lösung des vollständigen Problems) und  $|\alpha_2(T)|^2$  (rot für das Matrixmodell und grün für die Lösung des vollständigen Problems) mit Startvektor  $\Psi_1$  (links) bzw.  $\Psi_2$  (rechts) und  $T = 2500$  logarithmisch aufgetragen für verschiedene Radien  $r_f = r_\gamma$  nach einer vollständigen Umkreisung. Zusätzlich sind Nebenresonanzen in schwarz, türkis und lila eingezeichnet. Die Ergebnisse des Matrixmodelles sind mit durchgezogenen, die des vollständigen in gestrichelten Linien eingezeichnet. Die Ergebnisse des vollständigen Problems stammen von Lukas Oberreiter [8].



## 5. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde mithilfe eines Matrixmodelles die Umrundung eines exzeptionellen Punktes untersucht. Dazu wurde zuerst eine Matrix konstruiert, welche als Hamilton-Operator zur Lösung der Schrödingergleichung dienen soll. Zur Beschreibung der Umrundung wurde die Schrödingergleichung numerisch gelöst. Für die stationäre Lösung ist die typische Zustandsvertauschung der Zustände der exzeptionellen Punkte sehr gut zu erkennen.

Bei einer dynamischen Betrachtung des Problems stellte sich heraus, dass die Vertauschung deutlich von der Umlaufdauer abhängt. Bei schnellen Umrundungen findet keine Vertauschung statt, hier kommt der ursprüngliche Zustand der Änderung nicht hinterher und die Population verbleibt im Anfangszustand. Für langsame Umrundungen beginnt die Population den Zustand zu wechseln. Durch den exponentiellen Zerfall ist die absolute verbliebene Population in diesem exzeptionellen Punkt jedoch kaum mehr von Bedeutung.

Deshalb ist noch untersucht worden, wie die absolute Population nach einer Umrundung maximiert werden kann. Wird dazu wieder die Umlaufdauer variiert, ist zu erkennen, dass diese anfangs vom Vertauschungsverhalten, bei langsamerer Umrundung jedoch vom exponentiellen Zerfall dominiert wird, dazwischen befindet sich ein Maximum. Eine Variation des Startwinkels und der Radien der Umrundung zeigte, dass die Population langsamer zerfällt je weiter ihre Position im Parameterraum vom exzeptionellen Punkt entfernt ist.

Eine weitere wichtige Untersuchung war der Vergleich mit dem vollständigen Problem. Hierbei hat sich gezeigt, dass die Endpopulation des Modells für nicht allzu große Radien sehr genau mit der vollständigen Berechnung übereinstimmt.

Mithilfe des Matrixmodelles können also gute Vorhersagen getroffen werden, es kann noch zu weiteren Untersuchungen für andere Trajektorien der Umrundung und für andere exzeptionelle Punkte verwendet werden.



# A. Hartree-Einheiten

In dieser Arbeit werden die atomaren Hartree-Einheiten verwendet. Diese zeichnen sich dadurch aus, dass die Einheiten durch Naturkonstanten beschrieben werden. Die Folgenden dienen dabei zur Definition:

- Die Masse wird in Einheiten der Elektronenmasse  $m_e$  gemessen.
- Die Ladung wird in Einheiten der Elementarladung  $e$  angegeben.
- Der Drehimpuls wird durch das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  definiert.
- Die Länge ist ein Vielfaches des Bohr'schen Radius  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ .

| Größe                   | Hartree-Einheiten                       | SI-Einheiten                        |
|-------------------------|---|-------------------------------------|
| Masse                   | $m_e$                                   | $9,10938215 \cdot 10^{-31}$ Kg      |
| Ladung                  | $e$                                     | $1,60176487 \cdot 10^{-19}$ C       |
| Drehimpuls              | $\hbar = h/(2\pi)$                      | $1,054571628 \cdot 10^{-34}$ Js     |
| Länge                   | $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(m_e e^2)$ | $0,52917720859 \cdot 10^{-10}$ m    |
| Energie                 | $E_h = \alpha^2 m_e c^2$                | $4,35974398 \cdot 10^{-18}$ J       |
| Zeit                    | $t = \hbar/E_h$                         | $2,418884326505 \cdot 10^{-17}$ s   |
| Impuls                  | $p = \hbar/a_0$                         | $1,992851565 \cdot 10^{-24}$ Kg m/s |
| Elektrische Feldstärke  | $F_0 = E_h/(ea_0)$                      | $5,14220632 \cdot 10^{11}$ V/m      |
| Magnetische Flussdichte | $B_0 = \hbar/(ea_0^2)$                  | $2,350517382 \cdot 10^5$ T          |

Tabelle A.1.: Hartree-Einheiten und ihr Umrechnungsfaktor in SI-Einheiten nach [9]



## B. Das Runge-Kutta-Verfahren

Ein iteratives Verfahren zur Lösung von Differenzialgleichungen erster Ordnung, also der Form  $\dot{y}(t) = f(y, t)$ , ist das Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung. Es lautet

$$k_1 = f(y_n, t_n) \quad , \quad (\text{B.1})$$

$$k_2 = f\left(y_n + k_1 \frac{\Delta t}{2}, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right) \quad , \quad (\text{B.2})$$

$$k_3 = f\left(y_n + k_2 \frac{\Delta t}{2}, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right) \quad , \quad (\text{B.3})$$

$$k_4 = f(y_n + k_3 \Delta t, t_n + \Delta t) \quad , \quad (\text{B.4})$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad . \quad (\text{B.5})$$

Wird die Schrödingergleichung (3.32) umgeformt zu

$$\text{Re} \left( \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \right) = +\text{Im} (\underline{H}) \cdot \text{Re} (|\psi\rangle) + \text{Re} (\underline{H}) \cdot \text{Im} (|\psi\rangle) \quad , \quad (\text{B.6})$$

$$\text{Im} \left( \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \right) = -\text{Re} (\underline{H}) \cdot \text{Re} (|\psi\rangle) + \text{Im} (\underline{H}) \cdot \text{Im} (|\psi\rangle) \quad , \quad (\text{B.7})$$

so lassen sich mit diesem Verfahren die Wellenfunktionen  $|\psi\rangle$  numerisch berechnen.





# Literaturverzeichnis

- [1] Matthias Feldmaier. Untersuchung exzeptioneller Punkte bei Exzitonen in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern, Masterarbeit, Universität Stuttgart (2015).
- [2] Nimrod Moiseyev. Quantum theory of resonances: calculating energies, widths and cross-sections by complex scaling. *Physics Reports* 302, 212–293 (1998).
- [3] William P. Reinhardt. Complex coordinates in the theory of atomic and molecular structure and dynamics. *Annual Review of Physical Chemistry* 33, 223–255 (1982).
- [4] Tosio Kato. *Perturbation theory for linear operators*, Band 132. Springer Science & Business Media (1976).
- [5] Holger Cartarius. Exceptional points in atomic spectra and Bose-Einstein condensates, Dissertation, Universität Stuttgart (2008) (2008).
- [6] 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).
- [7] Nimrod Moiseyev. *Non-Hermitian quantum mechanics*. Cambridge University Press (2011).
- [8] Lukas Oberreiter. Zustandsvertauschung bei exzeptionellen Punkten im Spektrum des Wasserstoffatoms in parallelen elektrischen und magnetischen Feldern, Masterarbeit, Universität Stuttgart (2016), in Vorbereitung.
- [9] Peter J. Mohr und Barry N. Taylor. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2002. *Reviews of modern physics* 77, 1 (2005).



# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mir das Schreiben dieser Bachelorarbeit ermöglicht haben.

Dazu möchte ich zuerst Herrn Apl. Prof. Dr. Jörg Main danken, der mir immer eine Hilfe war und mich sehr gut betreut hat.

Außerdem danke ich Matthias Feldmaier, der mir während der Arbeit immer sehr geholfen hat.

Ein weiterer Dank gilt Lukas Oberreiter für die gute Zusammenarbeit und die Bereitstellung der Daten des vollständigen Problems.

Außerdem danke ich allen Mitarbeitern des 1. Instituts für Theoretische Physik für die freundliche Arbeitsumgebung.

Zuletzt möchte ich mich noch bei meiner Familie und meinen Freunden bedanken.



## Erklärung

Ich versichere,

- dass ich diese Bachelorarbeit 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 18. August 2016

*Jan Burkhardt*