

Kapitel 4

Tridiagonalisierung mittels Verfahren von Givens

Um die gemeinsamen Punkte der Energieflächen aufsuchen zu können, werden die beiden 8×8 Matrizen in eine geeignete Form gebracht. Es ist günstig die Matrizen zu tridiagonalisieren. Dies kann bei den vorliegenden reellen symmetrischen Matrizen mittels des Verfahrens von *Givens* durchgeführt werden. Dabei werden die Elemente der Matrix außerhalb der Diagonale und den beiden Kodiagonalen durch mehrfache orthogonale Transformation mittels geeigneter Jacobi'scher Rotationsmatrizen (siehe Abb. 4.1) sukzessive zu Null gemacht. Diese Transformation liefert, im Sinne eines vorbereitenden Schrittes, den Ausgangspunkt für das im nächsten Kapitel beschriebene Verfahren. Im Gegensatz zum Jacobiverfahren, das die Matrix näherungsweise diagonalisiert, ist die Tridiagonalisierung nach Givens exakt möglich.

$$U(p, q; \varphi) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & \cos \varphi & & & \sin \varphi & \\ & & & & 1 & & & \\ & & & & & \ddots & & \\ & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & \cos \varphi \\ & & & & & & & & 1 \\ & & & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

\uparrow
 p

\uparrow
 q

Abb. 4.1: Jacobi'sche Rotationsmatrix

Die Orthogonalität der Matrix $U(p, q; \varphi)$ ist offenkundig. Wenn man $U(p, q; \varphi)$ als Darstellungsmatrix einer linearen Transformation im R^n auffaßt, entspricht sie einer Drehung um

den Winkel $-\varphi$ in der zweidimensionalen Ebene, aufgespannt durch die p -te und die q -te Koordinatenrichtung.

Die Wirkung dieser (p, q) -Rotationsmatrix auf eine Matrix A im Fall einer Ähnlichkeitstransformation $A'' = U^{-1}AU = U^T AU$ stellen wir in zwei Schritten fest. Die Multiplikation der Matrix A von links mit U^T zur Matrix $A' = U^T A$ bewirkt nur eine Linearkombination der p -ten und q -ten Zeilen von A , während die übrigen Matrixelemente unverändert bleiben. Die Elemente von $A' = U^T A$ sind gegeben durch

$$\begin{aligned} a'_{pj} &= a_{pj} \cos\varphi - a_{qj} \sin\varphi \\ a'_{qj} &= a_{pj} \sin\varphi + a_{qj} \cos\varphi \end{aligned} \quad (j = 1, 2, \dots, n); \quad (4.1)$$

$$a'_{ij} = a_{ij} \quad \text{für } i \neq p, q. \quad (4.2)$$

Die anschließende Multiplikation der Matrix A' von rechts mit U zur Bildung von $A'' = A'U$ bewirkt jetzt nur eine Linearkombination der p -ten und q -ten Spalten von A' , während alle anderen Spalten unverändert bleiben. Die Elemente von $A'' = A'U = U^T AU$ sind gegeben durch

$$\begin{aligned} a''_{ip} &= a'_{ip} \cos\varphi - a'_{iq} \sin\varphi \\ a''_{iq} &= a'_{ip} \sin\varphi + a'_{iq} \cos\varphi \end{aligned} \quad (i = 1, 2, \dots, n); \quad (4.3)$$

$$a''_{ij} = a'_{ij} \quad \text{für } j \neq p, q. \quad (4.4)$$

Zusammenfassend kann man festhalten, daß eine Ähnlichkeitstransformation der Matrix A mit einer (p, q) -Rotationsmatrix U nur die Elemente der p -ten und q -ten Zeilen und Spalten verändert, wie dies in Abb. 4.2 anschaulich dargestellt ist.

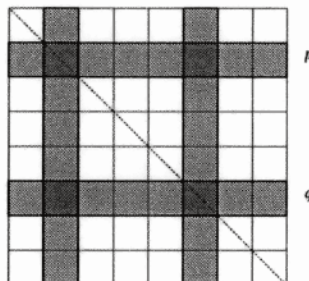


Abb. 4.2: Wirkung der Ähnlichkeitstransformation: Eine Jacobi-Rotation ändert nur die Elemente in den grauen Feldern.

Die gewünschte Transformation wird erreicht durch eine geeignete Folge von Jacobi-Rotationen, wobei in jedem Schritt ein Matrixelement zum Verschwinden gebracht wird. Dabei wird darauf geachtet, daß ein einmal auf Null gebrachtes Matrixelement durch nachfolgende Drehung den Wert Null beibehält.

Zur Durchführung der Transformation existieren zahlreiche Möglichkeiten. Es ist naheliegend, die Matrixelemente unterhalb der Nebendiagonale spaltenweise in der Reihenfolge

$$a_{31}, a_{41}, \dots, a_{n1}, a_{42}, a_{52}, \dots, a_{n2}, a_{53}, \dots, a_{n, n-2} \quad (4.5)$$

zu eliminieren. Man wählt nun als korrespondierende Rotationsindexpaare

$$(2,3), (2,4), \dots, (2,n), (3,4), (3,5), \dots, (3,n), (4,5), \dots, (n-1,n), \quad (4.6)$$

Zur Elimination des aktuellen Elementes $a_{ij} \neq 0$ mit $i \geq j+2$ wird gemäß (4.5) und (4.6) eine $(j+1, i)$ -Drehung angewandt. Das Element a_{ij} wird durch diese Rotation nur von der Zeilenoperation betroffen. Die Forderung, daß das transformierte Element verschwinden soll, liefert nach (4.1) wegen $p = j+1 < i = q$ die Bedingung

$$a'_{ij} = a_{j+1, j} \sin \varphi + a_{ij} \cos \varphi = 0. \quad (4.7)$$

Zusammen mit der Identität $\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi = 1$ ist das Wertepaar $\cos \varphi$ und $\sin \varphi$, abgesehen von einem wählbaren Vorzeichen, bestimmt.

$$\text{Falls } a_{j+1, j} \neq 0: \quad \cos \varphi = \frac{|a_{j+1, j}|}{\sqrt{a_{j+1, j}^2 + a_{ij}^2}}, \quad \sin \varphi = \frac{-\text{sgn}(a_{j+1, j})a_{ij}}{\sqrt{a_{j+1, j}^2 + a_{ij}^2}}. \quad (4.6)$$

$$\text{Falls } a_{j+1, j} = 0: \quad \cos \varphi = 0, \quad \sin \varphi = 1. \quad (4.7)$$

Nun bleibt noch zu verifizieren, daß mit der Rotationsreihenfolge (4.6) die Transformation einer symmetrischen Matrix A auf tridiagonale Form erreicht wird. Dazu ist zu zeigen, daß die bereits erzeugten verschwindenden Matrixelemente durch spätere Drehungen unverändert bleiben. Für die erste Spalte ist dies offensichtlich der Fall, denn jede der $(2, i)$ -Rotationen betrifft nur die zweite und die i -te Zeile und Spalte, wobei genau das Element a_{i1} eliminiert

wird. Für die Transformation der weiteren Spalten zeigen wir dies durch einen Induktions-schluß.

Dazu nehmen wir an, daß die ersten r Spalten bereits in die gewünschte Form gebracht worden seien. Zur Elimination der Elemente $a_{i,r+1}$ der $(r+1)$ -ten Spalte mit $i \geq r+3$ werden sukzessive $(r+2,i)$ -Drehungen angewandt. Unter den getroffenen Voraussetzungen werden in den ersten r Spalten durch die Zeilenoperation nur Nullelemente miteinander linear kombiniert, sodaß diese unverändert bleiben. Da $i > r+2$ ist, werden in der Spaltenoperation nur Spalten mit Indizes größer als $(r+1)$ verändert.

Aufgrund der Erhaltung der Symmetrie der Matrix A bei Ähnlichkeitstransformationen kann bei der Durchführung der Givens-Rotationen allein mit den Matrixelementen in und unterhalb der Hauptdiagonale gearbeitet werden. Abb. 4.3 veranschaulicht die typische Situation zur Elimination des Elementes a_{ij} ($i \geq j+2$).

Es ergibt sich folgender Ablauf:

- 1) In der j -ten Spalte ist nur das Element $a_{j+1,j}$ zu ersetzen.
- 2) Es werden die drei Matrixelemente in den Kreuzungspunkten umgerechnet.
- 3) Behandlung der Matrixelemente zwischen den Kreuzungspunkten in der $(j+1)$ -ten Spalte und der i -ten Zeile.
- 4) Transformation der Elemente unterhalb der i -ten Zeile, die in der $(j+1)$ -ten und der i -ten Spalte liegen.

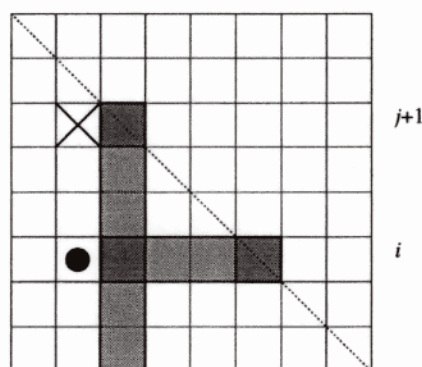


Abb. 4.3: Givens-Rotation für eine symmetrische Matrix. Das durch ● symbolisierte Element wird zu Null gemacht, die grauen Felder und das Kodiagonalelement X werden verändert. (Wegen Symmetrie wird nur die Hauptdiagonale und untere Dreiecksmatrix betrachtet.)

Algorithmus von Givens

Die Transformation einer symmetrischen Matrix A der Ordnung n auf tridiagonale Form besitzt damit eine einfache algorithmische Beschreibung. δ bedeutet die kleinste positive Zahl, sodaß im Rechner gerade noch $1 + \delta \neq 1$ gilt.

für $j = 1, 2, \dots, n-2$:

für $i = j+2, j+3, \dots, n$:

falls $a_{ij} \neq 0$ dann

falls $|a_{j+1,j}| < \delta \cdot |a_{ij}|$ dann

$$w = -a_{ij}; c = 0; s = 1$$

sonst $w = \operatorname{sgn}(a_{j+1,j}) \sqrt{a_{j+1,j}^2 + a_{ij}^2}$

$$c = \frac{a_{j+1,j}}{w}, s = -\frac{a_{ij}}{w}$$

$$a_{j+1,j} = w; a_{ij} = 0$$

$$d = a_{j+1,j+1} - a_{ii}; z = (d \times s + 2 \times c \times a_{i,j+1}) \times s$$

$$a_{i,j+1} = d \times c \times s + a_{i,j+1} \times (c \times c - s \times s)$$

$$a_{j+1,i} = a_{j+1,j+1} - z; a_{ii} = a_{ii} + z$$

für $k = j+2, j+3, \dots, i-1$:

$$h = c \times a_{k,j+1} - s \times a_{ik}$$

$$a_{ik} = s \times a_{k,j+1} + c \times a_{ik}; a_{k,j+1} = h$$

für $k = i+1, i+2, \dots, n$:

$$h = c \times a_{k,j+1} - s \times a_{ki}$$

$$a_{ki} = s \times a_{k,j+1} + c \times a_{ki}; a_{k,j+1} = h$$

Kapitel 5

Methode zur Bestimmung der Parameterwerte, für die Entartung der Eigenwerte einer parametrisierten symmetrischen Matrix auftritt

Eine reguläre symmetrische $(n \times n)$ Matrix M sei in tridiagonaler Form gegeben.

$$M = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & \\ & & & & \beta_{n-1} & \alpha_n & \end{pmatrix}$$

Abb. 5.1: Schematische Darstellung einer Matrix in tridiagonaler Form. Die Elemente außerhalb der Diagonale bzw. der beiden Kodiagonalen sind gleich Null.

Dann ist eine notwendige Bedingung für zweifache Entartung, daß zumindest ein Element der oberen Kodiagonale verschwindet (und damit, wegen der Symmetrie der Matrix, auch das entsprechende Element der unteren Kodiagonale), und die Matrix in zwei Hauptdiagonalblöcke¹ zerfällt (siehe Abb. 5.2).

¹ Im folgenden wird "Hauptdiagonalblock" kurz durch "Block" bezeichnet.

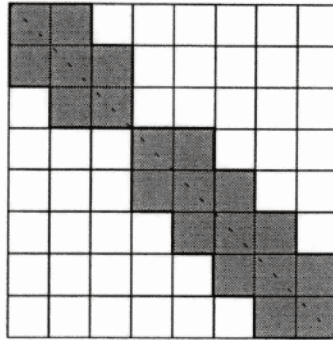


Abb. 5.2: Durch das Verschwinden eines Kodiagonalelementes zerfällt die tridiagonale Matrix in zwei Blöcke. (Die "weißen" Elemente sind null.)

Das kann man sich folgendermaßen durch einen Induktionsschluß klarmachen. Angenommen $\vec{\varphi}_1$ und $\vec{\varphi}_2$ seien zwei orthonormale Eigenvektoren zum gleichen Eigenwert ϵ . Dann ist auch jede Linearkombination der beiden

$$\sum_{i=1}^2 a_i \vec{\varphi}_i \quad a_i \in \mathbb{R} \quad (5.1)$$

wieder ein Eigenvektor.

Hilfssatz: Unter all diesen gibt es zumindest einen, verschieden vom Nullvektor, dessen 1. Komponente in der gegebenen Darstellung null ist.

Zum Beweis muß man zeigen, daß es in dem durch $\vec{\varphi}_1$ und $\vec{\varphi}_2$ aufgespannten linearen zwei-dimensionalen Teilraum T einen Vektor gibt, der orthogonal zum 1. Basisvektor \vec{e}_1 der gegebenen Darstellung ist.

Fall 1) Der Vektor \vec{e}_1 ist orthogonal zu $\vec{\varphi}_1$ und $\vec{\varphi}_2$.

Damit sind alle Vektoren des Raumes T orthogonal zu \vec{e}_1 , und obiger Satz ist trivialerweise erfüllt.

Fall 2) Der Vektor \vec{e}_1 ist entweder zu $\vec{\varphi}_1$ oder $\vec{\varphi}_2$ nicht orthogonal.

Dann existiert die Orthogonalprojektion des Vektors \vec{e}_1 auf T :

$$\vec{\varphi}_1(\vec{\varphi}_1 \cdot \vec{e}_1) + \vec{\varphi}_2(\vec{\varphi}_2 \cdot \vec{e}_1) \quad (5.2)$$

Der zu diesem orthogonale Vektor in T ist:

$$\vec{\varphi}_2(\vec{\varphi}_1 \cdot \vec{e}_1) - \vec{\varphi}_1(\vec{\varphi}_2 \cdot \vec{e}_1) \quad (5.3)$$

Dieser Vektor ist auch orthogonal zu \vec{e}_1 , denn

$$\vec{e}_1 \{ \vec{\varphi}_2(\vec{\varphi}_1 \cdot \vec{e}_1) - \vec{\varphi}_1(\vec{\varphi}_2 \cdot \vec{e}_1) \} = (\vec{e}_1 \cdot \vec{\varphi}_2)(\vec{\varphi}_1 \cdot \vec{e}_1) - (\vec{e}_1 \cdot \vec{\varphi}_1)(\vec{\varphi}_2 \cdot \vec{e}_1) = 0. \quad (5.4)$$

Damit ist obiger Hilfssatz bewiesen.

Im folgenden bezeichne $\vec{\psi}$ diesen Vektor aus T mit verschwindender erster Komponente. Wir nehmen nun an, alle Elemente der Kodiagonale seien von Null verschieden. Weil $\vec{\psi}$ Eigenvektor ist, muß auch die erste Komponente des Vektors, der durch Multiplikation der Matrix M mit $\vec{\psi}$ (in der gegebenen Darstellung) entsteht, verschwinden (siehe Abb. 5.3).

Da, wie angenommen, alle Elemente der Kodiagonale von Null verschieden sind, ist das nur möglich, wenn auch die 2. Komponente von $\vec{\psi}$ Null ist, wovon man sich durch Bilden des Skalarproduktes des Vektors $\vec{\psi}$ mit dem 1. Zeilenvektor der Matrix M überzeugen kann.

Daraus folgt nun wieder, daß auch die 2. Komponente des Vektors auf der rechten Seite obiger Eigenwertgleichung null sein muß.

$$M \cdot \vec{\psi} = \varepsilon \cdot \vec{\psi}$$

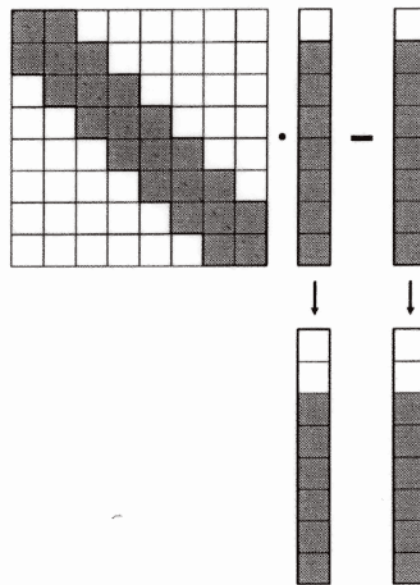


Abb. 5.3: Veranschaulichung der im Text beschriebenen Gedankenschritte.

In analoger Weise kann man nun auf das Verschwinden der 3. Komponente von $\vec{\psi}$ schließen, und diese Überlegung läßt sich bis zur letzte Komponente weiterführen.

Es folgt also, daß bei den gegebenen Bedingungen, $\vec{\psi}$ nur der Nullvektor sein kann. Dieser Widerspruch mit der Aussage des Hilfssatzes ist nur aufzulösen, indem man fordert, daß zumindest ein Element der Kodiagonale verschwindet.

Beachtet man, daß die Elemente der Matrix Funktionen reellwertiger Parameter sind, so ergibt sich daraus folgende notwendige Bedingung für zweifache Entartung:

$$m_{k,k+1}(p_i) = f_1^k(p_i) = 0 \quad \begin{array}{l} m_{k,k+1} \dots k. \text{ Element der Kodiagonale} \\ p_i \dots \text{ reellwertige Parameter} \end{array} \quad (5.5)$$

5.1 Methode 1

Eine zweite Bedingung für zweifache Entartung ergibt sich einfach daraus, daß es aus dem Eigenwertspektrum eines Blockes einen Eigenwert geben muß, der identisch mit einem Eigenwert aus dem Spektrum des anderen Blockes ist.

Diese Bedingung läßt sich schreiben als

$$f_2^k(p_i) = 0 \quad (5.6)$$

Gäbe es nämlich zwei identische Eigenwerte aus dem Spektrum eines einzelnen Blockes, so müßte, wenn man obige Überlegungen nur auf den zugehörigen Teilraum beschränkt, dieser seinerseits durch das Verschwinden eines Kodiagonalelementes in zwei Blöcke zerfallen.

Für Entartung mit dem Entartungsgrad zwei müssen also zwei unabhängige Gleichungen der Parameter erfüllt sein. Der Übergang auf den Fall des allgemeinen Entartungsgrades g ist einfach.

Einerseits muß durch das Verschwinden von $g - 1$ Elementen der Kodiagonale die Matrix in g Blöcke zerfallen, und andererseits muß es aus den Eigenwertspektren eines jeden Blockes einen Eigenwert geben, so daß diese paarweise identisch sind².

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \dots = \varepsilon_{g-1} = \varepsilon_g \quad (5.7)$$

Dies ergibt weitere $g - 1$ Gleichungen. Man erhält also insgesamt für den Fall der g -fachen Entartung $2 \cdot (g - 1)$ Gleichungen, die simultan erfüllt werden müssen.

² Der Index entspricht hier der "Nummer" des Blockes.

In unserem Fall interessieren wir uns für die Werte des Parameterpaares E, B , für die die die Eigenwerte der zwei 8×8 Matrix zweifach entartet sind.

Mit obigem Verfahren wird dieses Problem auf das Problem der Lösung eines Gleichungssystems der Parameter übertragen.

$$\begin{aligned} f_1^k(E, B) &= 0, \\ f_2^k(E, B) &= 0, \end{aligned} \quad k = 1, 2, \dots, 7, \quad (5.8)$$

Einer der Vorteile dieses Verfahren ist, daß man sich bereits vor der Lösung ein Bild von der zu erwartenden Lösungsmanigfaltigkeit machen kann.

Beiden Gleichungen entsprechen Kurven in der Parameterebene. Im allgemeinen werden sich diese beiden Kurven in Punkten schneiden. Nur in diesen isolierten Punkten in der Parameterebene tritt Entartung auf.

5.2 Methode 2

Hier wird nur auf den Fall zweifacher Entartung eingegangen. Führt man vor Tridiagonalisierung eine geeignete Orthogonaltransformation der Matrix durch, so wird durch Anwendung des Algorithmus von Givens eine andere aber ähnliche Tridiagonalmatrix erhalten. Die Menge der Kurven, die dem Verschwinden irgend eines Kodiagonalelementes entspricht

$$f_3^k(E, B) = 0 \quad k = 1, 2, \dots, 7 \quad (5.9)$$

wird i. a. nicht mehr dieselbe sein. Die gesuchten Punkte müssen sowohl auf irgend einer Kurve der einen als auch der anderen Menge liegen, sodaß nur mehr die Schnittpunkte der beiden in Frage kommen. Allerdings ist das Auftreten eines Schnittpunktes noch keine hinreichende Bedingung für Entartung. Man muß also noch jeden Punkt näher untersuchen.

Eine Möglichkeit eine hinreichende Bedingung für Entartung in diesen Punkten zu erhalten ohne die Eigenwerte auszurechnen bietet die Untersuchung der Transformationsmatrix zwischen den beiden Tridiagonalmatrixen.

5.2.1 Eine hinreichende Bedingung für Entartung in den Schnittpunkten

Die Darstellung eines linearen Operators durch eine Matrix in tridiagonaler Form ist nicht eindeutig. Man kann also zwei nichtidentische (aber ähnliche) tridiagonale Matrizen $M^{(1)}$ und $M^{(2)}$ mit der orthonormierten Basis $\{\vec{e}_i^{(1)}\}$ bzw. $\{\vec{e}_i^{(2)}\}$ finden, die beide Darstellungen des selben symmetrischen Operators sind.

Wir betrachten nun den Fall, daß jeweils ein Element der Kodiagonale beider Matrizen verschwindet, die Eigenwerte aber *nicht* entartet sind. Die gemäß Abb. 5.4 dabei entstehenden Hauptdiagonalblöcke seien $M_i^{(1)}$ bzw. $M_j^{(2)}$ ($i = 1, 2$, $j = 1, 2$). Der Zerfall der Matrizen in zwei Blöcke bedeutet eine Aufteilung in jeweils zwei zueinander orthogonale Teilräume $T_{1,2}^{(1)}$ bzw. $T_{1,2}^{(2)}$. Dabei bildet ein Teil $\{\vec{e}_i^{(1)}\}_1$ der Basisvektoren $\{\vec{e}_i^{(1)}\}$, aber auch ein Teil der Eigenvektoren $\{\vec{\varphi}_i\}_1^{(1)}$, jeweils eine Basis des ersten Teilraumes $T_1^{(1)}$, der andere Teil der Basisvektoren $\{\vec{e}_i^{(1)}\}_2$, und auch der Rest der Eigenvektoren $\{\vec{\varphi}_i\}_2^{(1)}$, jeweils eine Basis des zweiten Teilraumes $T_2^{(1)}$. Ebensozliches gilt für die Basisvektoren $\{\vec{e}_i^{(2)}\}$ bezüglich der Teilräume $T_{1,2}^{(2)}$.

Sind die Eigenwerte der Matrizen nichtentartet, so sind notwendigerweise alle Eigenvektoren einer symmetrischen Matrix paarweise zueinander orthogonal.

$$\vec{\varphi}_k \cdot \vec{\varphi}_l = \delta_{kl} \quad (5.10)$$

Dies bedeutet eine Einschränkung der möglichen geometrischen Lage der Räume $T_k^{(1)}$ und $T_l^{(2)}$ zueinander. Sehr übersichtlich lassen sich die Verhältnisse an der orthogonalen Matrix P , die die Transformation vom System $\{\vec{e}_i^{(1)}\}$ in das System $\{\vec{e}_i^{(2)}\}$ darstellt, ablesen.

Die Matrixelemente von P sind:

$$P_{ij} = \vec{e}_i^{(1)} \cdot \vec{e}_j^{(2)} \quad (5.11)$$

Auf die in Abb. 5.4 angedeutete Weise, kann die Matrix P in Untermatrizen P_{ij} aufgeteilt werden, wodurch die Übermatrix P' mit den Matrixelementen P_{ij} entsteht.

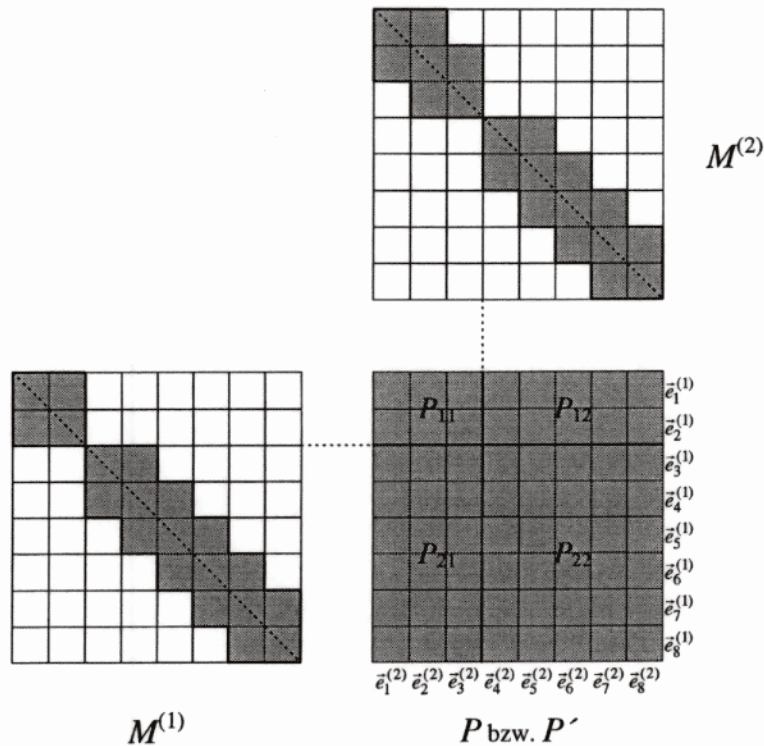


Abb. 5.4: Auf die hier angedeutete Weise wird die orthogonale Matrix P aufgeteilt, sodaß die Übermatrix P' entsteht.

In jeder Untermatrix P_{ij} ist vollständig die Information über die Lage der Teilräume $T_i^{(1)}$ und $T_j^{(2)}$ zueinander enthalten.

Wie im folgenden gezeigt wird, ist das Quadrat der Norm jeder Untermatrix P_{ij} , gegeben durch die Wurzel aus der Summe über die Quadrate aller ihrer Elemente, für P_{11} also z.B.

$$\|P_{11}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^3 p_{ij}^2}, \quad (5.12)$$

im Falle der Nichtentartung von $M^{(1)}$ bzw. $M^{(2)}$ eine ganze Zahl größer gleich Null:

$$\|P_{ij}\|^2 \in N_0 \quad (5.13)$$

Wir beweisen dies anhand des Beispiels der Untermatrix P_{11} .

Die Beträge der Spaltenvektoren der Matrix P_{11} sind gleich der Längen der Orthogonalprojektionen der Basisvektoren $\{\bar{e}_i^{(2)}\}_1$ von $T_1^{(2)}$ auf den Teilraum $T_1^{(1)}$ im System

$\{\bar{e}_i^{(1)}\}$, und diese sind unabhängig von der speziellen Basis von $T_1^{(1)}$. Selbiges gilt natürlich für die Summe der Betragsquadrate aller Spaltenvektoren der Matrix P_{11} , was das gleiche wie das Quadrat der Norm von P_{11} ist. Analog kann man über die Zeilenvektoren von P_{11} auf die Unabhängigkeit bezüglich der Basis des Teilraumes $T_1^{(2)}$ schließen. Wählt man $\{\bar{\varphi}_i^{(1)}\}_1$ als Basis von $T_1^{(1)}$ und $\{\bar{\varphi}_i^{(2)}\}_1$ als Basis von $T_1^{(2)}$, so erhält man unter Berücksichtigung der obigen Überlegungen für das Normquadrat der Matrix P_{11} :

$$\|P_{11}\|^2 = \sum_{\bar{\varphi}_k \in \{\bar{\varphi}_i^{(1)}\}_1} \left[\sum_{\bar{\varphi}_l \in \{\bar{\varphi}_i^{(2)}\}_1} (\bar{\varphi}_k \cdot \bar{\varphi}_l)^2 \right]. \quad (5.14)$$

Mit (10) erhält man weiter:

$$\|P_{11}\|^2 = \sum_{\bar{\varphi}_k \in \{\bar{\varphi}_i^{(1)}\}_1} \left[\sum_{\bar{\varphi}_l \in \{\bar{\varphi}_i^{(2)}\}_1} \delta_{kl}^2 \right] \in N_0. \quad (5.15)$$

Das gleiche gilt natürlich für jede beliebige Matrix P_{ij} .

Auf jeden Fall, auch bei Entartung, ergibt die Summe der Normquadrate einer Zeile bzw. Spalte von P' immer eine ganze Zahl größer Null

$$\sum_j \|P_{ij}\|^2 \in N \quad \text{bzw.} \quad \sum_i \|P_{ij}\|^2 \in N, \quad (5.16)$$

denn diese ist ja eine Summe von Betragsquadraten auf 1 normierter Zeilen- bzw. Spaltenvektoren. Ist das Normquadrat eine beliebige Untermatrix P_{ij} eine nichtganze Zahl

$$\|P_{ij}\|^2 \notin N_0, \quad (5.17)$$

dann muß es wegen (5.16) zumindest eine Matrix P_{ik} in der gleichen Zeile und zumindest eine Matrix P_{ij} in der gleichen Spalte von P' geben, wobei gilt:

$$\|P_{ik}\|^2 \notin N_0 \quad \text{und} \quad \|P_{ij}\|^2 \notin N_0. \quad (5.18)$$

Aus analogen Überlegungen folgt, daß auch

$$\|P_{lk}\|^2 \notin N_0 \quad (5.19)$$

gelten muß (siehe Abb.5.5).

$\ P_{11}\ ^2 \notin N_0$	$\ P_{12}\ ^2 \notin N_0$
$\ P_{21}\ ^2 \notin N_0$	$\ P_{22}\ ^2 \notin N_0$

Abb. 5.5: Ist das Normquadrat eines Elementes einer (2×2) Übermatrix P' eine nichtganze Zahl, dann gilt das auch für die restlichen Elemente.

Außerdem müssen wegen Nichterfüllung der Bedingung (5.13) die Eigenwerte entartet sein. Insbesondere bedeutet Gleichung (5.17), daß es aus dem Eigenwertspektrum der Matrix $M_i^{(1)}$ bzw. $M_j^{(2)}$ einen Eigenwert gibt, der wegen (5.18) identisch mit einem Eigenwert aus dem Eigenwertspektrum der Matrix $M_i^{(1)}$ bzw. $M_k^{(2)}$ sein muß. Es liegt also zweifache Entartung vor.

Kapitel 6

Numerische Berechnung der Crossingpunkte

Bei der Auswertung aller Kodiagonalelemente der beiden 8×8 Matrizen sind zwei Fälle zu unterscheiden:

- 1.) Mehrere Elemente der Kodiagonale verschwinden gleichzeitig bei $E = 0$, B beliebig.
- 2.) Das letzte Element der Kodiagonale verschwindet: $f_1^7(E, B) = 0$.

6.1 Anwendung der Methode 2

Für die Durchführung der Methode 2 genügt es die Funktion $f_1^k(E, B) = 0$ ($k = 1, 2, \dots, 7$) auszuwerten. Man macht sich dabei eine Symmetrie der noch nicht tridiagonalisierten 8×8 Matrizen $H_{\text{even/odd}}$ ¹ zu nutze:

Beide Matrizen sind symmetrisch bezüglich der Kombination der Transformationen $B \rightarrow -B$ und anschließender Spiegelung an der Nebendiagonale (siehe Abb. 6.1).

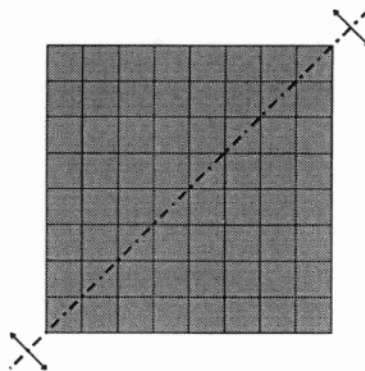


Abb. 6.1: Die 8×8 Matrizen sind bezüglich einer Transformation $B \rightarrow -B$ und anschließender Spiegelung an der Nebendiagonale symmetrisch.

¹ Die Matrizen $H_{\text{even/odd}}$ bezeichnen die noch nicht tridiagonalisierten 8×8 Matrizen des geraden/ungeraden Systems.

Oder mit anderen Worten: Die Transformation $B \rightarrow -B$ entspricht einer Spiegelung an der Nebendiagonale. Diese Spiegelung ist nun auch eine spezielle unitäre Transformation, die eine neue ähnliche Matrix ergibt.

$$UH_{\text{even/odd}}^{(1)}U^T = H_{\text{even/odd}}^{(2)} \quad (6.1)$$

mit

$$U = U^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Wie man leicht sieht, bedeutet diese orthogonale Transformation nur ein Umsortieren der Basisvektoren.

Die Matrix $H_{\text{even/odd}}^{(2)}$ ergibt sich nun einfach aus der Matrix $H_{\text{even/odd}}^{(1)}$ indem man B durch $-B$ ersetzt. Dasselbe gilt nun für die beiden mit demselben Algorithmus tridiagonalisierte Matrizen $\bar{H}_{\text{even/odd}}^{(1)}$ und $\bar{H}_{\text{even/odd}}^{(2)}$.

Das heißt aber, daß die Kurven $f_1^k(E, B) = 0$ ($k = 1, 2, \dots, 7$) durch Spiegelung an der E -Achse in die Kurven $f_3^k(E, B) = 0$ ($k = 1, 2, \dots, 7$) übergehen.

Die durchgezogene Kurven in den Abbn. 6.5 entspricht den Funktionen $f_1^k(E, B) = 0$ ($k = 1, 2, \dots, 7$), die Spiegelung dieser Kurven an der E -Achse (gestrichelte Kurve) den Funktion $f_3^k(E, B) = 0$ ($k = 1, 2, \dots, 7$). In den Schnittpunkten der beiden Kurvenmengen verschwindet also gleichzeitig zumindest ein Element der Kodiagonalen zweier verschiedener Darstellungen. Es genügt also die Schnittpunkte der Kurve $f_1^k(E, B) = 0$ ($k = 1, 2, \dots, 7$) mit ihrem Spiegelbild nach Entartungspunkten abzusuchen².

² Zu beachten ist, daß auch die B -Achse eine Lösung der Gleichung $f_1^k(E, B) = 0$ ($k = 1, 2, \dots, 7$) darstellt.

6.2 Anwendung der Methode 1

In beiden Systemen verschwinden mehrere Kodiagonalelemente entlang der B -Achse. Durch Spiegelung an der E -Achse wird diese in sich selbst übergeführt. In diesem Fall lässt sich die Transformationsmatrix gemäß Kap. 5.2.1 leicht untersuchen.

Der Grund ist die spezielle Form der Ausgangsmatrizen $H_{\text{even/odd}}^{(1)}$ bei $E = 0$. Diese Matrizen liegen in Hauptdiagonalblockform vor. Gemäß Abb. 4.3 wirken die einzelnen Givens-Rotationen entweder auf den einen oder den anderen Block. Dabei bleibt die Blockform unabhängig ob entartet oder nicht auf jeden Fall erhalten. Selbiges gilt natürlich auch für die an der Nebendiagonale gespiegelten Ausgangsmatrizen $H_{\text{even/odd}}^{(2)}$.

Die Aufteilung der Transformationsmatrix P in Untermatrizen geschieht für das gerade System auf die in Abb. 6.2 dargestellte Weise.

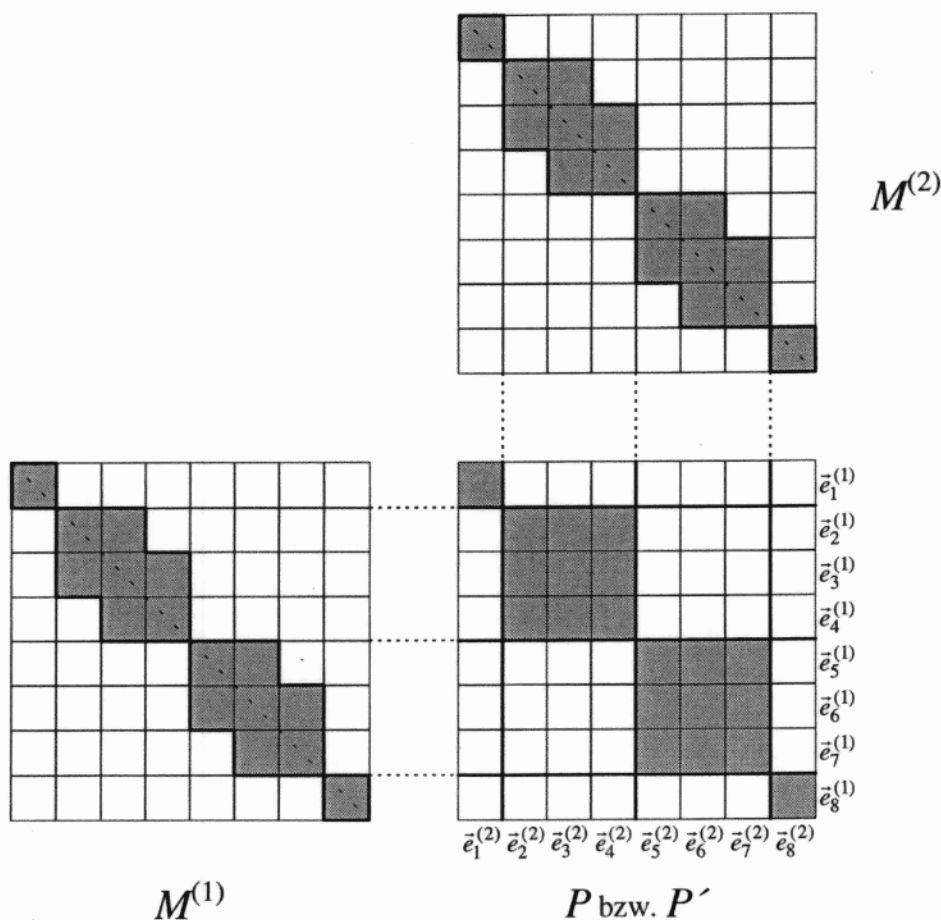


Abb. 6.2: Aufteilung der orthogonalen Matrix P in Untermatrizen am Beispiel des geraden Systems. Die entstehende Übermatrix P' hat Diagonalform.

Die Übermatrix P' hat Diagonalform. Daher ist das Normquadrat jedes Elementes von P' eine ganze Zahl. Die Untersuchung der Transformationsmatrix liefert also keine hinreichende Bedingung für Entartung für den Fall $E = 0$. Analoges liefert die Aufteilung der Matrix P gemäß dem ungeraden System.

Für das Aufsuchen der Entartungspunkte auf der B -Achse muß man also die Methode 1 heranziehen.

6.3 Algorithmus zur Bestimmung der Kurven $f_1^k(E, B) = 0$

Es ist, wie sich zeigt, nicht zielführend zu versuchen, ohne Werte für E und B festzulegen, durch ein *Mathematica*-Programm die Givens-Transformation symbolisch durchzuführen, da auf diese Weise riesige nicht mehr handhabbare Ausdrücke für die resultierenden Matrixelemente entstehen. Man kann sich aber gewisse Eigenschaften dieser Matrixelemente für ein recht effektives Programm zu Nutze machen.

Aufgrund der Stetigkeit und Differenzierbarkeit der Matrixelemente der Ausgangsmatrix bezüglich der beiden Parameter E und B , und wegen der Stetigkeit und Differenzierbarkeit der Funktionen dieser Matrixelemente in dem Algorithmus von Givens, werden auch die Matrixelemente der resultierenden Tridiagonalmatrix stetige und differenzierbare Funktionen von E und B sein. Damit liegt folgende Vorgehensweise nahe:

Kennt man irgend einen Punkt der Kurve $f_1^k(E, B) = 0$ und die Richtung der Tangente in diesem exakt, dann kann man sich in kleinen Schritten entlang der Kurve $f_1^k(E, B) = 0$ vorwärts bewegen, indem man (wegen Stetigkeit) die Umgebung vor dem aktuellen Punkt im Abstand der Schrittweite nach der "nächsten" Nullstelle der Funktion $f_1^k(E, B)$ absucht. Dabei kann man sich (wegen Differenzierbarkeit) bei hinreichend kleiner Schrittweite auf einen schmalen Winkelbereich um die Richtung der Tangente beschränken. Die Richtung der aktuellen Tangente wird durch die Verbindungsgerade der beiden letzten Punkte genähert.

Das Kernstück dieser numerischen Methode ist das Aufsuchen der Nullstelle innerhalb des Winkelbereiches. Der *Mathematica*-Befehl **FindRoot[]** verwendet, wenn man als Parameter die Bereichsgrenzen (Winkel) eingibt, das dem Newton-Raphson- nahe verwandte Intervallschachtelungs-Verfahren, auf das hier kurz näher eingegangen wird.

6.3.1 Nullstellenbestimmung mittels Intervallschachtelungsverfahren

Diese Methode wird häufig dann zur Bestimmung der Nullstellen einer Funktion $F(x)$ verwendet, wenn die Berechnung der Ableitung aus irgendwelchen Gründen Schwierigkeiten bereitet. Dabei wird einfach in der bekannten Iterationsvorschrift von Newton und Raphson

$$x_{t+1} = x_t - \frac{F(x_t)}{F'(x_t)} \quad (6.2)$$

der Differentialquotient $F'(x_t)$ durch den Differenzenquotienten $\frac{F(x_t) - F(x_{t-1})}{x_t - x_{t-1}}$ ersetzt:

$$x_{t+1} = x_t - F(x_t) \cdot \frac{x_t - x_{t-1}}{F(x_t) - F(x_{t-1})} \quad (6.3)$$

Graphisch bedeutet das, daß die Newton'sche Tangentenmethode durch eine Sekantenmethode ersetzt wird (siehe Abb. 6.3).

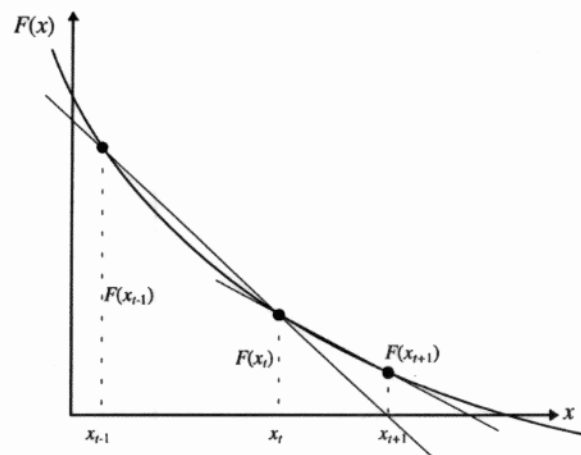


Abb. 6.3: Graphische Interpretation der Regula Falsi.

Angenommen es sei bekannt, daß sich eine Nullstelle in dem Intervall $[x_1, x_2]$ befindet. Dies kann daran überprüft werden, daß innerhalb dieses Intervalls ein Vorzeichenwechsel der Funktion $F(x)$ auftritt, daß also gilt:

$$F_1 \cdot F_2 < 0 \quad (6.4)$$

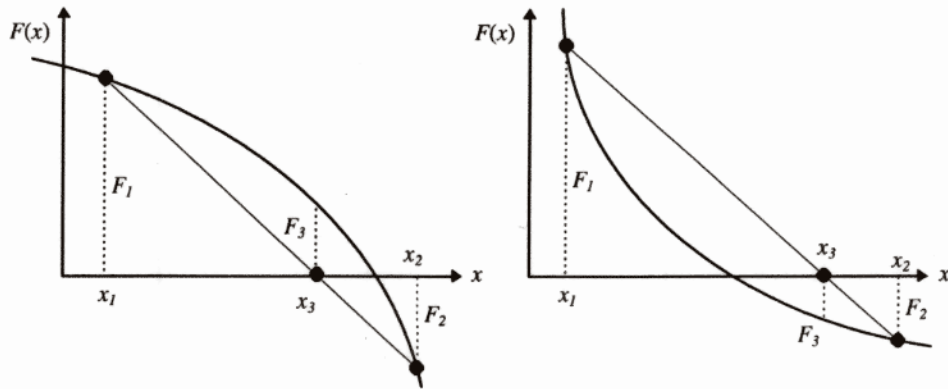


Abb. 6.4: Graphische Darstellung des Intervallschachtelungs-Verfahrens.

Als erstes wird nun die Regula Falsi Formel (6.3) für $x_{t-1} = x_1$ und $x_t = x_2$ angewandt. Damit erhält man eine verbesserte Nullstellennäherung x_3 (siehe Abb. 6.4).

$$x_3 = x_2 - \frac{F_2(x_2 - x_1)}{F_2 - F_1} \quad (6.4)$$

Als nächstes wird ein neues (schmäleres) Einschlußintervall für die gesuchte Nullstelle festgelegt, und zwar auf folgende Weise:

- Falls $F_3 \cdot F_2 \leq 0$, d.h. falls die Nullstelle im Intervall $[x_3, x_2]$ liegt, werden die neuen Intervallgrenzen wie folgt definiert:

$$x_1^{neu} \leftarrow x_3 \quad \text{und} \quad F_1^{neu} \leftarrow F_3$$

x_2 und F_2 bleiben unverändert.

- Falls $F_3 \cdot F_2 > 0$, d.h. falls die Nullstelle im Intervall $[x_1, x_3]$ liegt, wird an der (unveränderten) Stelle x_1 ein neuer Wert

$$F_1^{neu} \leftarrow F_1 \cdot \frac{F_2}{F_2 + F_3}$$

definiert.³ Außerdem wird

$$x_2^{neu} \leftarrow x_3 \quad \text{und} \quad F_2^{neu} \leftarrow F_3$$

gesetzt.

³ Der Grund dieser nicht sofort einsichtigen Festlegung ist das Erreichen einer höheren Konvergenzgeschwindigkeit.

Diese Intervallschachtelung wird solange fortgesetzt, bis die Intervallbreite $x_2 - x_3$ kleiner als eine vorgegebene Genauigkeitsschranke ist.

In unserem speziellen Problem entspricht dem Startintervall $[x_1, x_2]$ natürlich einem Winkelbereich $[\alpha - \Delta\alpha, \alpha + \Delta\alpha]$. Dabei ist α der Winkel zwischen der "Tangente" an die Kurve $f_1^k(E, B) = 0$ im aktuellen Punkt ξ_t , gegeben durch die Verbindungsgerade von ξ_t und ξ_{t-1} , und einer beliebigen fixen Bezugsachse in der Parameterebene, und $2 \cdot \Delta\alpha$ ist die vorgebbare Intervallbreite. Es ist klar, daß diese umso kleiner gewählt werden kann, je kleiner die Schrittweite zwischen den Punkten ξ_t und ξ_{t+1} ist. Die Funktion $F(x)$ ist gegeben durch die Funktion $f_1^k(\alpha) = f_1^k(E(\alpha), B(\alpha))$, wobei den Punkten $E(\alpha)$, $B(\alpha)$ der Kreis um den Punkt ξ_t mit dem Radius gleich der Schrittweite entspricht.

6.3.2 Ein möglicher Startpunkt

Einen geeigneten Anfangspunkt zu finden bereitet keinerlei Schwierigkeiten. Denn im feldfreien Fall sind alle Subniveaus der Hyperfeinstruktur entartet. Andererseits treten in den Matrixelementen nur Terme auf, die entweder gar nicht oder quadratisch von der elektrische Feldstärke E abhängen, sodaß die Kurven $f_1^k(E, B) = 0$ symmetrisch bezüglich einer Spiegelung an der E -Achse sind, und die Tangenten der Kurve in den Punkten bei $E = 0$ diese in einem rechten Winkel schneiden werden. Wir haben also mit $\{E = 0, B = 0\}$ einen Startpunkt gefunden.

6.4 Parameterwerte der Entartungspunkte

Eine nähere Untersuchung der Schnittpunkte der durchgezogenen mit der gestrichelten Linie, als Lösung der Gleichungen $f_1^k(E, B) = 0$ bzw. $f_3^k(E, B) = 0$ innerhalb des betrachteten Feldstärkebereiches ($0 \leq E \leq 100 \text{ kV/cm}$, $0 \leq B \leq 100 \text{ mT}$), ergaben die in den Abb. 6.5 durch ● gekennzeichneten Entartungspunkte.

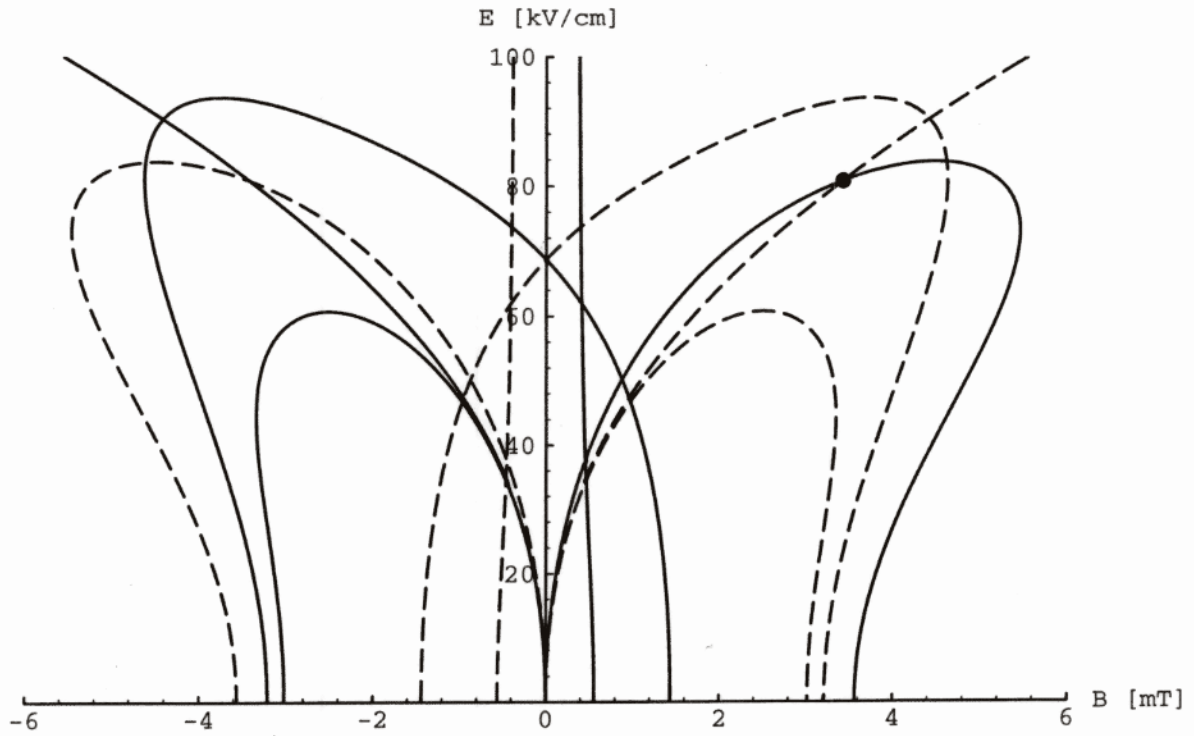


Abb. 6.5a: Die Kurve $f_1^k(E, B) = 0$ (—) und deren Spiegelbild $f_3^k(E, B) = 0$ (- - -) für das **gerade** System. Die Schnittpunkte der beiden, die auch Entartungspunkte darstellen, sind mit ● gekennzeichnet.

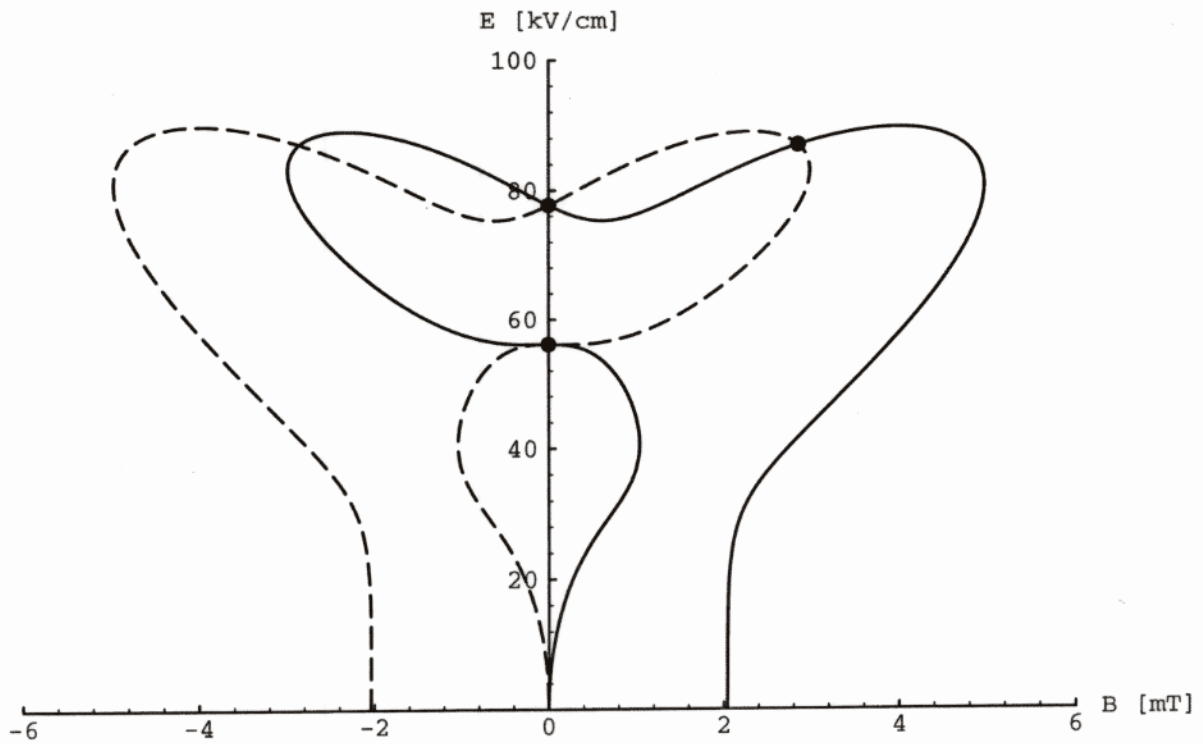


Abb. 6.5b: Die Kurve $f_1^k(E, B) = 0$ (—) und deren Spiegelbild $f_3^k(E, B) = 0$ (- - -) für das **ungerade** System. Die Schnittpunkte der beiden, die auch Entartungspunkte darstellen, sind mit ● gekennzeichnet.

Die auf der B -Achse liegenden Entartungspunkte mußten, wegen der in Kap. 6.2 dargelegten Gründe, mit der Methode 1 aus Kap. 5.1 berechnet werden. Einen Überblick über alle Entartungspunkte beider Systeme zeigen die Abbn. 6.6.

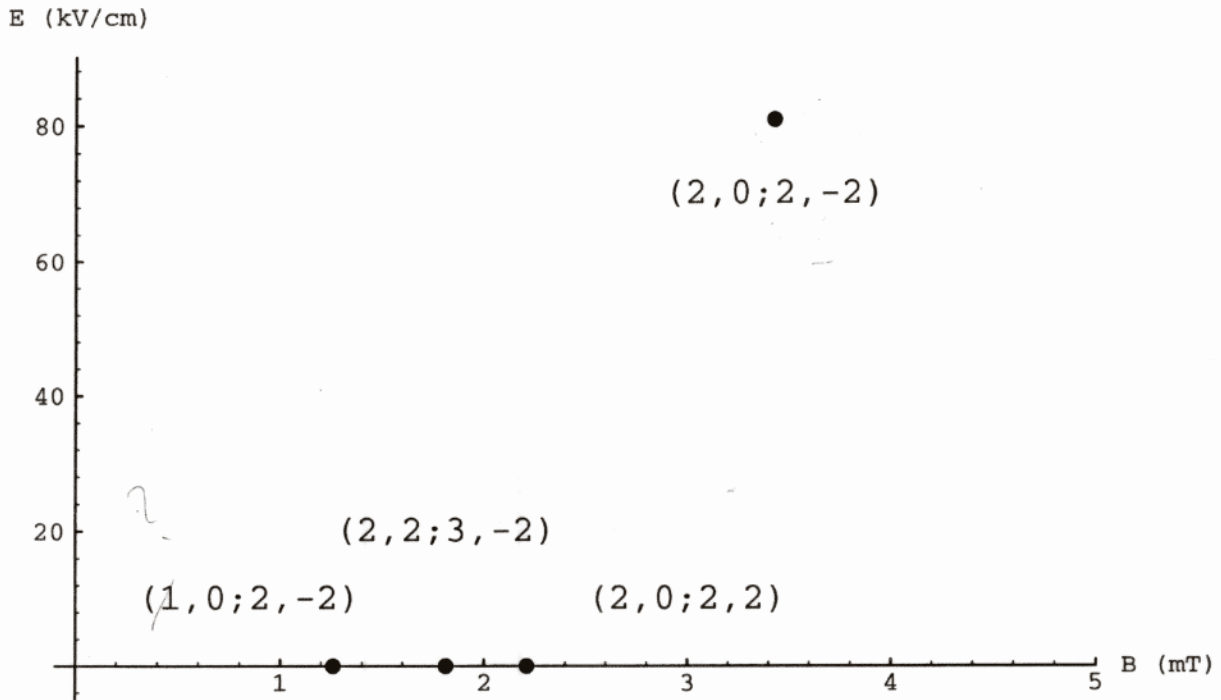


Abb. 6.6a: Alle Entartungspunkte im geraden System innerhalb des Feldstärkebereiches ($0 \leq E \leq 100$ kV/cm, $0 \leq B \leq 100$ mT).

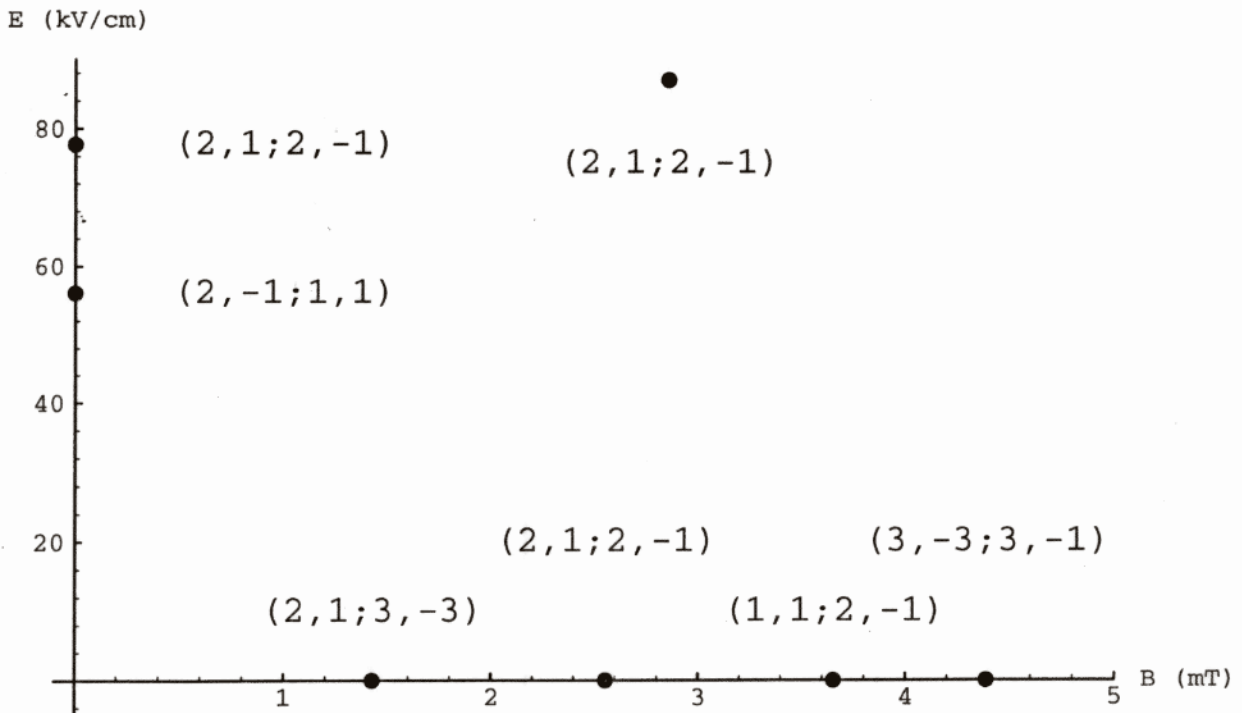


Abb. 6.6b: Alle Entartungspunkte im ungeraden System innerhalb des Feldstärkebereiches ($0 \leq E \leq 100$ kV/cm, $0 \leq B \leq 100$ mT).

Anhang: Werte der verwendeten Atomkonstanten.

Zur Berechnung der Matrixelemente der Störmatrix wurden folgende empirische Werte [1,13] für die Atomkonstanten verwendet:

$\hat{g}_I = g_I \frac{m_e}{m_p}$	g_J	$a(J)$ [MHz]	$b(J)$ [MHz]	α_0 [kHz/(kV/cm) ²]	α_2 [kHz/(kV/cm) ²]
$+8.046108(8) \cdot 10^{-4}$	1.3344(4)	18.52(15)	2.98(34)	88.98(87)	-21.97(10)

Tab. 6.2: Kern- und Hüllendaten von Na für das Niveau $3p^2P_{3/2}$.

- \hat{g}_I g -Faktor des Kernes
- g_J g -Faktor der Elektronenhülle
- $a(J), b(J)$... diagonale Hyperfeinstruktur-Konstanten
- α_0, α_2 skalare bzw. tensorielle Polarisierbarkeit

Zur Berechnung der Energieflächen und der Kreuzungspunkte mußten diese empirischen, mit Fehlern behafteten Werte als exakte Werte behandelt werden.

In den Tabn. 6.1 sind die genauen Parameterwerte dazu aufgelistet. Sie beinhalten neben den Feldwerten die Energieeigenwerte und die Quantenzahlenpaare der beiden sich treffenden Flächen.

n	E [kV/cm]	B [mT]	Energie [MHz]	F, M_F
1	0	1.25868085640	-41.8431154520	(2,-2), (1,0)
2	0	1.812481611936	13.28749999999	(3,-2), (2,2)
3	0	2.212172480109	7.8268643935369	(2,0), (2,2)
4	80.8461449210771	3.426873703913928	-329.868940169529	(2,-2), (2,0)

Tab. 6.1a: Feldwerte und Energieeigenwerte der Crossingpunkte und die Quantenzahlenpaare der sich treffenden Energieflächen für das **gerade** System innerhalb des Feldstärkebereiches ($0 \leq E \leq 100$ kV/cm, $0 \leq B \leq 100$ mT).

n	E [kV/cm]	B [mT]	Energie [MHz]	F, M_F
1	0	1.426974577823689	2.6322165379087	(3,-3), (2,1)
2	0	2.554449963892	-28.972646576317	(2,-1), (2,1)
3	0	3.655803003308	-59.845258669610	(1,1), (2,-1)
4	0	4.3893596393999	41.16343786269	(3,-3), (3,-1)
5	56.0987955092057	0	-172.071826124565	(2,-1), (1,1)
6	77.719945527434	0	-313.041040270200	(2,1), (2,-1)
7	87.0570864294284	2.855105708909045	-383.746912395498	(2,1), (2,-1)

Tab. 6.1b: Feldwerte und Energieeigenwerte der Crossingpunkte und die Quantenzahlenpaare der sich treffenden Energieflächen für das **ungerade** System innerhalb des Feldstärkebereiches ($0 \leq E \leq 100$ kV/cm, $0 \leq B \leq 100$ mT).

Neben den bereits bekannten Crossings bei $E = 0$ und $B = 0$, konnten also jeweils ein zusätzlicher Punkt bei $E \neq 0$, $B \neq 0$ im betrachteten Feldbereich gefunden werden.

Kapitel 7

Verhalten der (beteiligten) Eigenvektoren in der Nähe der Entartungspunkte

7.1 Ein einfaches Beispiel

Das charakteristische Verhalten der Eigenvektoren wird im folgenden an einem sehr einfachen Beispiel dargestellt. Im zweidimensionalen euklidischen Vektorraum ε sei die Wirkung der Operatoren \hat{A}_i ($i = 1, 2, \dots, n$) folgendermaßen gegeben: Projektion auf die Richtung des Einheitsvektors \vec{e}_i und anschließende Streckung um den Faktor a_i . Die Wirkung auf einen Vektor \vec{x} ist also:

$$\hat{A}_i \vec{x} = a_i \cdot \vec{e}_i (\vec{e}_i \cdot \vec{x}), \quad (7.1)$$

oder anders geschrieben

$$\hat{A}_i \vec{x} = [a_i \cdot (\vec{e}_i * \vec{e}_i)] \vec{x}; \quad (* \dots \text{dyadisches Produkt}). \quad (7.2)$$

Dies ist aber zugleich die entsprechende Spektraldarstellung eines symmetrischen Operators mit den Eigenwerten $(0, a_i)$, und den Eigenvektoren $(\vec{e}_i, \perp \vec{e}_i)$. Der Winkel zwischen \vec{e}_i und der x -Achse eines kartesischen Koordinatensystems $\{\vec{e}_x, \vec{e}_y\}$ in ε sei ϕ_i . Damit erhält man nach orthogonaler Transformation der Diagonalform mittels Rotationsmatrizen die Matrixdarstellung von \hat{A}_i .

$$\hat{A}_i = \begin{pmatrix} \cos \phi_i & -\sin \phi_i \\ \sin \phi_i & \cos \phi_i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_i & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \phi_i & \sin \phi_i \\ -\sin \phi_i & \cos \phi_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_i \cos^2 \phi_i & a_i \sin \phi_i \cos \phi_i \\ a_i \sin \phi_i \cos \phi_i & a_i \sin^2 \phi_i \end{pmatrix} \quad (7.3)$$

Die Summe der n Operatoren \hat{A}_i sei der symmetrische Operator \hat{B} .

$$\hat{B} = \sum_{i=1}^n A_i = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n a_i \cos^2 \phi_i & \sum_{i=1}^n a_i \sin \phi_i \cos \phi_i \\ \sum_{i=1}^n a_i \sin \phi_i \cos \phi_i & \sum_{i=1}^n a_i \sin^2 \phi_i \end{pmatrix}. \quad (7.4)$$

Es ist klar, daß jede Summe beliebiger zweidimensionaler symmetrischen Operatoren auf diese Weise dargestellt werden kann. Dabei hat man einfach für die a_i die Eigenwerte und für die \vec{e}_i die Eigenvektoren der einzelnen Summanden zu setzen.

Zur Auffindung der Eigenwerte und Eigenvektoren von \hat{B} geht man zunächst auf ein anderes Bild über. Ordnet man den Vektoren des zweidimensionalen euklidischen Raumes ϵ in gewohnter Weise gemäß einer Abbildung f komplexe Zahlen z der Gauß'schen Zahlenebene η zu, so daß $\vec{e}_x \mapsto 1$, $\vec{e}_y \mapsto i$ und $x \mapsto \operatorname{Re}(z)$, $y \mapsto \operatorname{Im}(z)$, dann entsprechen den Operatoren \hat{A}_i folgende komplexwertige Funktionen \tilde{A}_i , wenn man sich auf $|z|=1$ beschränkt.

$$\tilde{A}_i(z) = \frac{a_i}{2} \cdot \left(z + \frac{v_i^2}{z} \right), \quad \text{mit } \vec{e}_i \mapsto v_i \text{ und } |v_i|=1. \quad (7.5)$$

Für den Operator \hat{B} erhält man:

$$\tilde{B}(z) = \frac{1}{2} \cdot \left(z \cdot \sum_{i=1}^n a_i + \frac{1}{z} \cdot \sum_{i=1}^n a_i \cdot v_i^2 \right). \quad (7.6)$$

Der Eigenwertgleichung entspricht:

$$\tilde{B}(z) = \lambda \cdot z, \quad \lambda \in R. \quad (7.7)$$

Diese ist dann erfüllt, wenn für den zweiten Faktor des zweiten Terms der Funktion \tilde{B} gilt:

$$\sum_{i=1}^n a_i \cdot v_i^2 = \pm \rho \cdot z^2 \quad \rho \in R \quad (7.8)$$

oder mit $z = e^{i\theta}$ und $v_i = e^{i\phi_i}$

$$\sum_{i=1}^n a_i \cdot e^{i2\phi_i} = \pm \rho \cdot e^{i2\theta} \quad (7.9)$$

Aus den Glgn. (7.7), (7.8) bzw.(7.9), ergeben sich sofort die Eigenwerte

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \cdot \left(\sum_{i=1}^n a_i \pm \rho \right). \quad (7.10)$$

Man definiert nun eine Funktion \tilde{g} in η auf folgende Weise:

$$\begin{aligned} \tilde{g}: \quad C &\rightarrow C \\ a \cdot e^{i\alpha} &\mapsto a \cdot e^{2i\alpha} \quad \text{mit} \quad a, \alpha \in R. \end{aligned}$$

Damit läßt sich (7.9) schreiben als:

$$\sum_{i=1}^n \tilde{g}(a_i \cdot e^{i\phi_i}) = \pm \tilde{g}(\rho \cdot e^{i\theta}) \quad (7.11)$$

Wegen der Linearität von f bzw. f^{-1} gilt weiter

$$\sum_{i=1}^n f^{-1}(\tilde{g}(f(a_i \cdot \vec{e}_i))) = \pm f^{-1}(\tilde{g}(f(\rho \cdot \vec{e}))), \quad (7.12)$$

oder mit

$$f \circ \tilde{g} \circ f^{-1} = g, \quad (7.13)$$

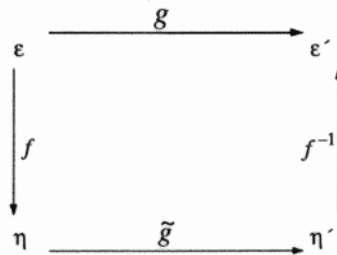
und

$$a_i \cdot \vec{e}_i = \vec{a}_i, \quad \rho \cdot \vec{e} = \vec{\rho}, \quad (7.14)$$

einfach:

$$\sum_{i=1}^n g(\vec{a}_i) = \pm g(\vec{\rho}) \quad (7.15)$$

Gemäß folgendem Abbildungsschema



wird durch g ein beliebiger Ortsvektor \vec{v} aus ϵ in einen Ortsvektor $g(\vec{v})$ gleicher Länge aber mit doppeltem Winkel zur x -Achse des zweidimensionalen euklidischen Raumes ϵ' abgebildet (siehe Abb. 7.1).

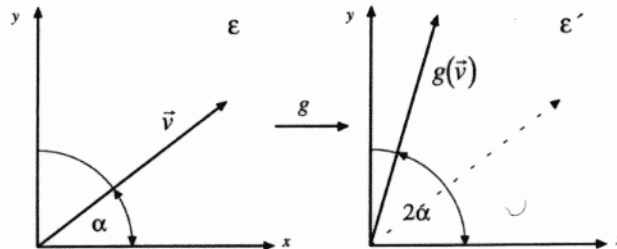


Abb. 7.1: Geometrische Veranschaulichung der Abbildung g .

Die Länge des Vektors $g(\vec{\rho})$, der sich gemäß (14) einfach als Vektorsumme aller n Vektoren $g(\vec{a}_i)$ in ϵ' ergibt (siehe Abb. 7.2), ist nach (7.10) die Differenz der beiden Eigenwerte:

$$\rho = |\epsilon_1 - \epsilon_2| \quad (7.16)$$

Der Winkel ϕ' des Vektors $g(\vec{\rho})$ zur x -Achse in ϵ' ist doppelt so groß wie der Winkel ϕ des Eigenvektors \vec{e} von \hat{B} zur x -Achse in ϵ .

$$\phi' = 2 \cdot \phi \quad (7.17)$$

Als Polarkoordinaten einer Parameterebene wählen wir nun die Länge des Vektors $g(\vec{\rho})$ bzw. dessen Winkel zur x -Achse. Die Parameterebene ist also gleich der Ebene ϵ' .

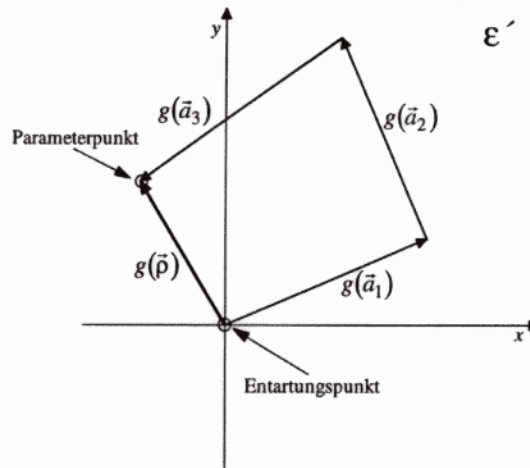


Abb. 7.2: *Parameterebene ε' . Die Vektorsumme aller n (hier $n = 3$) Vektoren $g(\vec{a}_i)$ ergibt den Vektor $g(\vec{\rho})$.*

Aus Glg. (7.16) erkennt man, daß Entartung auftritt, wenn ρ zu Null wird. In der Parameterebene ist das nur für den Koordinatenursprung erfüllt.

Wir testen nun obiges Verfahren zu Auffindung der Parameterwerte für Entartung an diesem einfachen Beispiel. Zweidimensionale Matrizen sind trivialerweise tridiagonal. Als erste Bedingung für Entartung muß das Element in der Kodiagonale von (7.4) verschwinden.

$$\sum_{i=1}^n a_i \sin \phi_i \cos \phi_i = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^n a_i \sin 2\phi_i = 0 \quad (7.18)$$

Der Ausdruck unter dem Summenzeichen ist aber die x -Koordinate des Vektors $g(\vec{a}_i)$. Mit (7.15) ergibt sich damit:

$$\sum_{i=1}^n \{g(\vec{a}_i)\}_x = \pm \{g(\vec{\rho})\}_x = 0 \quad (7.19)$$

Das entspricht in der Parameterebene genau der y -Achse in Abb. 7.2.

Als zweite Bedingung müssen die Eigenwerte der Teilmatrizen identisch sein. In unserem einfachen Fall sind das die Elemente der Hauptdiagonale selbst.

$$\sum_{i=1}^n a_i \cos^2 \phi_i = \sum_{i=1}^n a_i \sin^2 \phi_i \quad (7.20)$$

Das ergibt weiter:

$$\sum_{i=1}^n a_i (\cos^2 \phi_i - \sin^2 \phi_i) = \sum_{i=1}^n a_i \cos 2\phi_i = 0 \quad (7.21)$$

Hier ist der Ausdruck unter der Summe genau die y -Koordinate des Vektors $g(\vec{a}_i)$. Mit (7.15) erhält man weiter:

$$\sum_{i=1}^n \{g(\vec{a}_i)\}_y = \pm \{g(\vec{\rho})\}_y = 0 \quad (7.22)$$

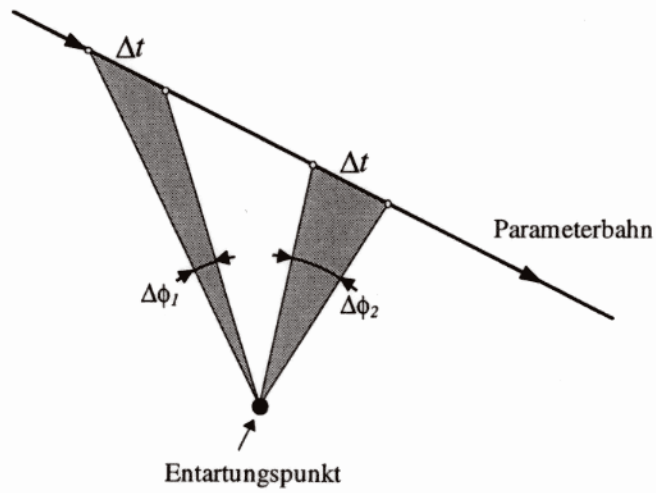
Diese Gleichung wird erfüllt von allen Punkten der x -Achse in der Parameterebene (Abb. 7.2). Der Koordinatenursprung als Schnittpunkt der x - und y -Achse ist der einzige Punkt, bei dem Entartung auftritt. Das entspricht genau dem Ergebnis von oben.

Die einfachen geometrischen Verhältnisse dieses Beispiels lassen nun das charakteristische Verhalten der beteiligten Eigenvektoren in der Nähe dieser Entartungsstelle deutlich werden.

Wegen (7.17) steht die Drehgeschwindigkeit $\dot{\phi}'$ des Ortsvektors $\vec{\rho}$ zum Parameterpunkt mit der Änderung $\dot{\phi}$ der Eigenvektoren von B in einem einfachen Zusammenhang:

$$\dot{\phi}' = 2 \cdot \dot{\phi} \quad (7.23)$$

Grob läßt sich qualitativ folgendes sagen: Bewegt man sich in der Parameterebene mit annähernd konstanter Geschwindigkeit entlang einer Kurve, so wird die Drehung des "Fahrstrahles" $\vec{\rho}$, und damit die Drehung des Eigenvektors \vec{e} , umso größer sein, je mehr man sich dem Koordinatenursprung, also dem Entartungspunkt nähert (siehe Abb. 7.3).



$$\frac{\Delta\phi_1}{\Delta t} < \frac{\Delta\phi_2}{\Delta t}$$

Abb. 7.3: *Unterschiedliche Drehgeschwindigkeit des Fahrstrahles $\vec{\rho}(t)$ für zwei Teilstrecken der Parameterbahn.*

7.2 Linien rotationsfreier Eigenvektorpaare

Einen Eindruck der Verhältnisse höherdimensionaler Matrizen kann man erhalten, indem man sich in der Parameterebene Linien zeichnet, entlang derer zwei Eigenvektoren benachbarter Eigenwerte innerhalb der Ebene ε , die sie selbst aufspannen, nicht rotieren. Ist die Winkeldifferenz zwischen zwei beliebigen benachbarten Linien immer dieselbe, so kann man für beliebige Zyklen anhand der Liniendichte die Rotationsfrequenzen dieser Eigenvektoren innerhalb der Ebene ε abschätzen.

7.2.1 Differentialgleichung rotationsfreier Linien

Bildet man das totale Differential der rechten und linken Seite der Eigenwertgleichung eines hermiteschen Operators¹ \hat{A}

$$\hat{A}|a_l\rangle = A_l|a_l\rangle, \quad (7.24)$$

so ergibt sich:

$$d\hat{A}|a_l\rangle + \hat{A}(d|a_l\rangle) = dA_l|a_l\rangle + A_l(d|a_l\rangle) \quad (7.25)$$

oder

$$(\hat{A} - A_l\hat{E})(d|a_l\rangle) = (-d\hat{A} + dA_l\hat{E})|a_l\rangle \quad (\hat{E} \dots \text{Einsoperator}), \quad (7.26)$$

Multipliziert man von links mit $\langle a_k |$, wobei $k \neq l$ sein soll, erhält man wegen $\langle a_k | \hat{A} = A_k \langle a_k |$ und $\langle a_k | a_l \rangle = 0$ (A_l sei nicht entartet):

$$\langle a_k | (\hat{A} - A_l\hat{E})(d|a_l\rangle) = \langle a_k | (-d\hat{A} + dA_l\hat{E})|a_l\rangle; \quad (7.26)$$

$$\rightarrow (A_k - A_l)\langle a_k | (d|a_l\rangle) = -\langle a_k | d\hat{A}|a_l\rangle. \quad (7.27)$$

¹ Im folgenden bezeichnen Großbuchstaben mit "Dach" Operatoren, ohne "Dach" Eigenwerte und Kleinbuchstaben Vektoren (Eigenvektoren).

Für die Komponente der Änderung $d|a_l\rangle$ in Richtung $\langle a_k|$ ergibt sich schließlich:

$$\langle a_k|(d|a_l\rangle) = \frac{\langle a_k|\hat{d}\hat{A}|a_l\rangle}{A_l - A_k} \quad (7.28)$$

Ist die Darstellungsmatrix des Operators \hat{A} reellwertig symmetrisch so bedeutet das:

$$\vec{a}_k \cdot d\vec{a}_l = \frac{\vec{a}_k d\hat{A}\vec{a}_l}{A_l - A_k} \quad (7.29)$$

Fordert man zusätzlich die Erhaltung der Normiertheit von \vec{a}_l , also

$$\vec{a}_l \cdot \vec{a}_l = 1 \quad \text{und} \quad \vec{a}_l \cdot (\vec{a}_l + d\vec{a}_l) = 1, \quad (7.30)$$

so folgt als notwendige Bedingung, wenn man die erste Gleichung in die zweite einsetzt:

$$\vec{a}_l \cdot d\vec{a}_l = 0 \quad (7.31)$$

$d\vec{a}_l$ ist also orthogonal zu \vec{a}_l .

Beachtet man den Nenner in (7.29), so erkennt man, daß in der Umgebung des Entartungspunktes zwischen den beiden Eigenwerten A_l und A_k die Komponenten $\vec{a}_k \cdot d\vec{a}_l$ und $\vec{a}_l \cdot d\vec{a}_k$ gegenüber den anderen dominieren (Für die Komponente $\vec{a}_l \cdot d\vec{a}_k$ ist das sofort einsichtig, wenn man in (7.29) l und k vertauscht).

Bei dieser Betrachtung muß man allerdings den Entartungspunkt selbst ausnehmen, da dort die rechte Seite von (7.29) singularär wird.

Aus (7.29) und (7.31) folgt, daß entlang rotationsfreier Linien der Zähler der rechten Seite von (7.29) verschwinden muß:

$$\vec{a}_k d\hat{A}\vec{a}_l = 0 \quad (7.32)$$

Wir nehmen nun an, der Operator \hat{A} sei abhängig von zwei Parametern λ_1 und λ_2 , auf folgende Weise:

$$\hat{A} = \lambda_1 \cdot \hat{B} + \lambda_2 \cdot \hat{C} + \hat{D} \quad (7.33)$$

Dabei seien \hat{B} , \hat{C} und \hat{D} konstant und symmetrisch.

Dann wird aus (7.32):

$$\bar{a}_k (d\lambda_1 \cdot \hat{B} + d\lambda_2 \cdot \hat{C}) \bar{a}_l = 0 \quad (7.34)$$

oder

$$\frac{d\lambda_2}{d\lambda_1} = - \frac{\bar{a}_k \hat{B} \bar{a}_l}{\bar{a}_k \hat{C} \bar{a}_l} . \quad (7.35)$$

7.2.2 Anfangswerte rotationsfreien Linien

Für zweiparametrische Matrizen der Form (7.33) ergibt sich mit Hilfe der in Kap. 7.1 gewonnenen Ergebnisse eine einfache Möglichkeit beliebige Anfangswerte für Linien mit konstanter Winkeldifferenz anzugeben.

$\{\bar{e}_i\}_{i=1,2}$ sei eine orthonormierte Basis von ε . Ein (symmetrischer) Projektionsoperator \hat{P} auf ε in seiner Spektraldarstellung ist damit:

$$\hat{P} = \bar{e}_1 * \bar{e}_1 + \bar{e}_2 * \bar{e}_2, \quad (* \dots \text{dyadisches Produkt}), \quad (7.36)$$

Der Operator $\hat{P} \hat{A} \hat{P}$ ist wieder symmetrisch:

$$(\hat{P} \hat{A} \hat{P})^T = (\hat{A} \hat{P})^T \hat{P}^T = \hat{P}^T \hat{A}^T \hat{P}^T = \hat{P} \hat{A} \hat{P}. \quad (7.37)$$

Ein beliebiger Eigenvektor von \hat{B} sei \bar{b}_i .

Für den Operator $\hat{P}(\bar{b}_i * \bar{b}_i) \hat{P}$ ergibt sich, wenn man (ohne Beschränkung der Allgemeinheit) annimmt, daß die Richtung von \bar{e}_1 mit der Orthogonalprojektion² \bar{b}_i^P von \bar{b}_i in ε zusammenfällt ($\Rightarrow \bar{e}_2 \cdot \bar{b}_i = 0$).

$$(\bar{b}_i * \bar{b}_i) \hat{P} = (\bar{b}_i * \bar{b}_i) \cdot (\bar{e}_1 * \bar{e}_1 + \bar{e}_2 * \bar{e}_2) = (\bar{b}_i \cdot \bar{e}_1) \cdot (\bar{b}_i * \bar{e}_1), \quad (7.38)$$

$$\hat{P}(\bar{b}_i * \bar{b}_i) \hat{P} = (\bar{e}_1 * \bar{e}_1 + \bar{e}_2 * \bar{e}_2) (\bar{b}_i \cdot \bar{e}_1) \cdot (\bar{b}_i * \bar{e}_1) = (\bar{b}_i \cdot \bar{e}_1)^2 \cdot (\bar{e}_1 * \bar{e}_1) = \bar{b}_i^P * \bar{b}_i^P. \quad (7.39)$$

² Der hochgestellte Index "P" bedeutet die Orthogonalprojektion in ε .

Damit erhält man für den Operator $\hat{P}\hat{A}\hat{P}$:

$$\begin{aligned}\hat{P}\hat{A}\hat{P} &= \hat{P}\left(\lambda_1 \cdot \sum_i B_i(\vec{b}_i * \vec{b}_i) + \lambda_2 \cdot \sum_i C_i(\vec{c}_i * \vec{c}_i) + \sum_i D_i(\vec{d}_i * \vec{d}_i)\right)\hat{P} = \\ &= \lambda_1 \cdot \sum_i B_i(\vec{b}_i^P * \vec{b}_i^P) + \lambda_2 \cdot \sum_i C_i(\vec{c}_i^P * \vec{c}_i^P) + \sum_i D_i(\vec{d}_i^P * \vec{d}_i^P).\end{aligned}\quad (7.40)$$

Das ist aber genau eine Summe von Operatoren, von der Art, wie sie im Kapitel 7.1 beschrieben werden.³

Wir bilden zunächst alle Vektoren $\vec{p}_i = B_i|\vec{b}_i^P| \cdot \vec{b}_i^P$, $\vec{q}_i = C_i|\vec{c}_i^P| \cdot \vec{c}_i^P$, $\vec{r}_i = D_i|\vec{d}_i^P| \cdot \vec{d}_i^P$ von ε auf eine Ebene ε' ab gemäß der in Kapitel 7.1 eingeführten Vorschrift g .

Bezeichnet man die Vektorsumme⁴

$$\sum_i g(\vec{p}_i) = \vec{b}, \quad \sum_i g(\vec{q}_i) = \vec{c} \quad \text{und} \quad \sum_i g(\vec{r}_i) = \vec{d}, \quad (7.41)$$

dann gilt für den Eigenvektor $\vec{a}_{k,l}$ von \hat{A} in ε' (siehe Abb. 7.4)

$$|A_k - A_l| \cdot g(\vec{a}_{k,l}) = \pm(\lambda_1 \cdot \vec{b} + \lambda_2 \cdot \vec{c} + \vec{d}), \quad (7.42)$$

und die Differenz der Eigenwerte ist

$$|A_k - A_l| = |\lambda_1 \cdot \vec{b} + \lambda_2 \cdot \vec{c} + \vec{d}|. \quad (7.43)$$

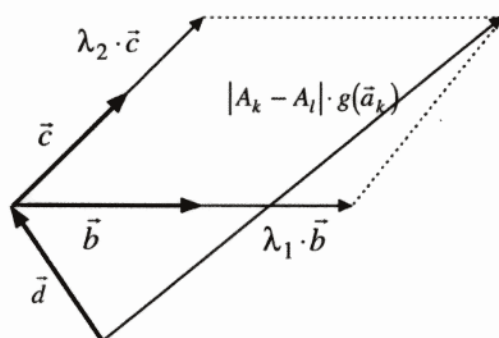


Abb. 7.4: Die Richtung der Vektorsumme $\lambda_1 \cdot \vec{b} + \lambda_2 \cdot \vec{c} + \vec{d}$ entspricht der Richtung der durch g in ε' abgebildeten Eigenvektoren $\vec{a}_{k,l}$.

³ Zu beachten ist, daß die \vec{b}_i^P bzw. \vec{c}_i^P , \vec{d}_i^P nicht mehr paarweise orthogonal sein müssen.

⁴ Die hier definierten Vektoren dürfen nicht mit den gleichlautenden aber mit Index versehenen Eigenvektoren verwechselt werden.

Vektoren in der Ebene ε' können mittels einer linearer Transformation, repräsentiert durch eine zweidimensionale Matrix \hat{T} , in die Parameterebene p übergeführt werden (siehe Abb. 7.5).

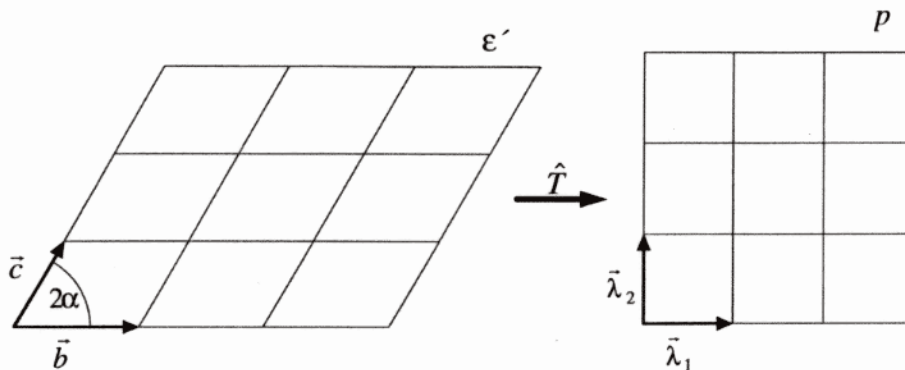


Abb. 7.5: Lineare Transformation \hat{T} der Ebene ε' in die Parameterebene p .

Wählt man den Vektor \vec{b} in Richtung $\vec{\lambda}_1$, dann erhält man für \hat{T} :

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} b & c \cdot \cos 2\alpha \\ 0 & c \cdot \sin 2\alpha \end{pmatrix}. \quad (7.44)$$

Die Eigenvektoren $\vec{a}_{k,l}$ ändern ihre Richtung in ε' genau dann nicht, wenn man in Richtung $g(\vec{a}_{k,l})$ in ε' voranschreitet. Transformiert man diesen in die Parameterebene, so erhält man den entsprechenden Richtungsvektor in der Parameterebene.

Im Entartungspunkt gilt:

$$|A_k - A_l| \cdot g(\vec{a}_{k,l}) = \pm(\lambda_1 \cdot \vec{b} + \lambda_2 \cdot \vec{c} + \vec{d}) = 0 \quad (7.45)$$

Die Richtung ist also unbestimmt.

Wählt man als Anfangspunkt einen Entartungspunkt so erhält man die Richtungsvektoren der Tangenten rotationsfreien Linien konstanter Winkeldifferenz indem man die Ortsvektoren äquidistanter Punkte des Einheitskreise in ε' mit der entsprechenden Matrix \hat{T} transformiert (siehe Abb. 7.6)

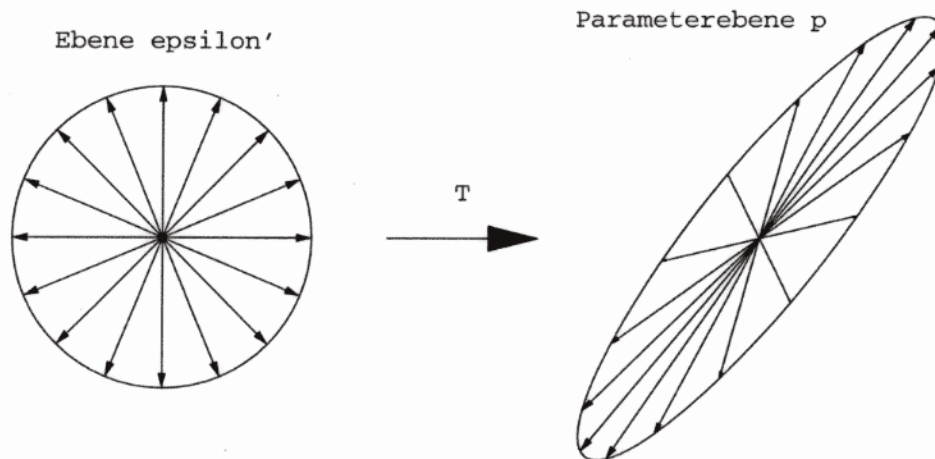


Abb. 7.6: Bestimmung der Richtungsvektoren ausgehend von Entartungspunkten für rotationsfreie Linien mit gleicher Winkeldifferenz.

7.2.2.1 Richtung des Anticrossings

Der Kreis, auf dem alle Ortsvektoren liegen wird durch \hat{T} in eine Ellipse übergeführt. Wegen (7.43) wird die Richtung des Anticrossings mit der Richtung der längeren Hauptachse der Ellipse zusammenfallen. Zur Berechnung dieser Richtung bedient man sich eines *Hilfssatzes*:

Polare Zerlegung eines linearen Operators:

Jeder lineare Operator \hat{T} eines euklidischen Raumes läßt sich in folgender Form darstellen:

$$\hat{T} = \hat{S}\hat{Q} \quad (7.46)$$

\hat{S} ist dabei ein positiv semidefiniter symmetrischer, \hat{Q} ist ein orthogonaler Operator.

Der geometrische Inhalt von (7.46) ist folgender: Eine lineare Transformation kann zerlegt werden in eine durch den orthogonalen Operator \hat{Q} realisierte Drehung des Raumes um den Koordinatenursprung und einer anschließenden Streckung längs n paarweise senkrechter Richtungen mit im allgemeinen verschiedenen Streckungsverhältnissen, realisiert durch \hat{S} .

Es ist klar, daß bei einer Drehung der Ebene ϵ' um den Mittelpunkt eines Kreises, dieser unverändert bleiben wird. Man braucht sich also nur um \hat{S} zu kümmern.

Um \hat{S} zu bestimmen multipliziert man (7.46) von rechts mit \hat{T}^T :

$$\hat{T}\hat{T}^T = \hat{S}\hat{Q}\hat{Q}^T\hat{S} = \hat{S}^2 \quad (7.47)$$

Damit erhält man:

$$\hat{S} = \sqrt{\hat{T}\hat{T}^T} \quad (7.48)$$

Ein zweidimensionaler linearer symmetrischer Operator \hat{S} transformiert einen Kreis bekanntlich in eine Ellipse deren Hauptachsen in Richtung der Eigenvektoren $\vec{s}_{1,2}$ liegen.

Multipliziert man die Eigenwertgleichung des Operators \hat{S}

$$\hat{S}\vec{s}_i = S_i\vec{s}_i \quad (7.49)$$

von links mit \hat{S} , so ergibt sich:

$$\hat{S}^2\vec{s}_i = S_i(\hat{S}\vec{s}_i) = S_i^2\vec{s}_i \quad (7.50)$$

bzw.

$$\hat{T}\hat{T}^T\vec{s}_i = S_i^2\vec{s}_i \quad (7.51)$$

Der Eigenvektor des Operators $\hat{T}\hat{T}^T$, der zum größeren Eigenwert gehört, bestimmt also die Richtung des Anticrossings von einem Entartungspunkt aus.

7.2.3 Numerische Berechnung der Linien rotationsfreier Eigenvektorpaare der Matrizen $H_{eve/odd}$

Wegen

$$H_{mag}(B) = H_{mag}(1) \cdot B \quad (7.52)$$

und

$$H_{elec,eff}(E) = H_{elec,eff}(1) \cdot E^2 \quad (7.53)$$

lassen sich die Gesamtmatrix H , und damit auch die beiden 8×8 Matrizen, in einer zu (7.33) analogen Form schreiben:

$$H(E, B) = H_{hfs} + H_{mag}(1) \cdot B + H_{elec,eff}(1) \cdot E^2 \quad (7.54)$$

Zur Bestimmung der rotationsfreien Linien hat man die entsprechende Differentialgleichung (7.35) zu lösen.

Der hierbei verwendete Algorithmus ist sehr primitiv, liefert aber, wenn man nicht zu hohe Anforderungen an die Genauigkeit stellt, zufriedenstellende Ergebnisse:

Man bewegt sich einen kleinen Schritt von einem Startpunkt aus in Richtung der Tangente der gesuchten Linie und erhält so einen neuen Punkt, der wieder zum Ausgangspunkt desselben Verfahrens wird, um den nächste Punkt zu erhalten. Dieses Verfahren führt besonders für Kurven mit großer Krümmung zu schlechten Resultaten. Daher wird als Verbesserung des Algorithmus' die Schrittweite dynamisch an die aktuelle Krümmung angepaßt.

Jedem Paar solcher Eigenvektoren entspricht ein Paar benachbarter Energieflächen. Die Crossingpunkte, die diese beiden Flächen verbinden, treten als Quellpunkte des Liniensystems auf (siehe die Abbn. 7.7).

Abb. 7.7b zeigt das Beispiel des Flächenpaares $(2, -1), (2, 1)^5$ im ungeraden System. Die Crossingpunkte, die diese Flächen verbinden sind die in Tab. 6.1b mit den Nummern 2, 6 und 7 bezeichneten. Dazu kommt noch der Nullpunkt für den feldfreien Fall. Die Anticrossings,

⁵ Hier wird die in Kap.3 eingeführte Notation verwendet.

besonders das des Punktes 7 ($E \neq, B \neq 0$), äußern sich durch die sehr stark ausgeprägten Maxima der Liniendichte in der entsprechenden Richtung.

Die Winkeldifferenz zwischen den beiden Ästen einer ohne Knick durch einen Crossingpunkt laufende Linie⁶ ist nach den Überlegungen aus Kap. 7.2 gleich $\pi/2$. Wie man aus den Abb. 7.7 erkennen kann, passiert eine Richtungsänderung der Einvektoren um beinahe $\pi/2$ allein beim Überschreiten des Anticrossings in der Nähe des Crossingpunktes; die beiden Eigenvektoren vertauschen also nahezu schlagartig ihre Richtung. Ist die Rotationsfrequenz hinreichend groß, wird die adiabatische Näherung keine gültige Beschreibung mehr sein. Wählt man stattdessen für das Überschreiten des Anticrossings die "sudden approximation" als Näherung der Entwicklung des Zustandsvektors, und für den Rest eines geschlossene Zyklus, der nicht durch eine Crossingpunkt läuft, die adiabatische Näherung, so ergibt sich folgende Vermutung:

Der Zustandsvektor, der bis kurz vor dem Anticrossing identisch mit einem Eigenvektor $\vec{\varphi}_1$ des Paares $(\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_2)$ war, bleibt beim schnellen Austausch der beiden Eigenvektoren konstant, sodaß er nach dem Anticrossing mit dem *anderen* Eigenvektor $\vec{\varphi}_2$ identifiziert werden kann. Es wird also auch hier ein Leveltransfer stattfinden.

⁶ vorausgesetzt keiner der beiden zu \vec{b} und \vec{c} analogen Vektoren (Kap. 7.2.2) verschwindet.

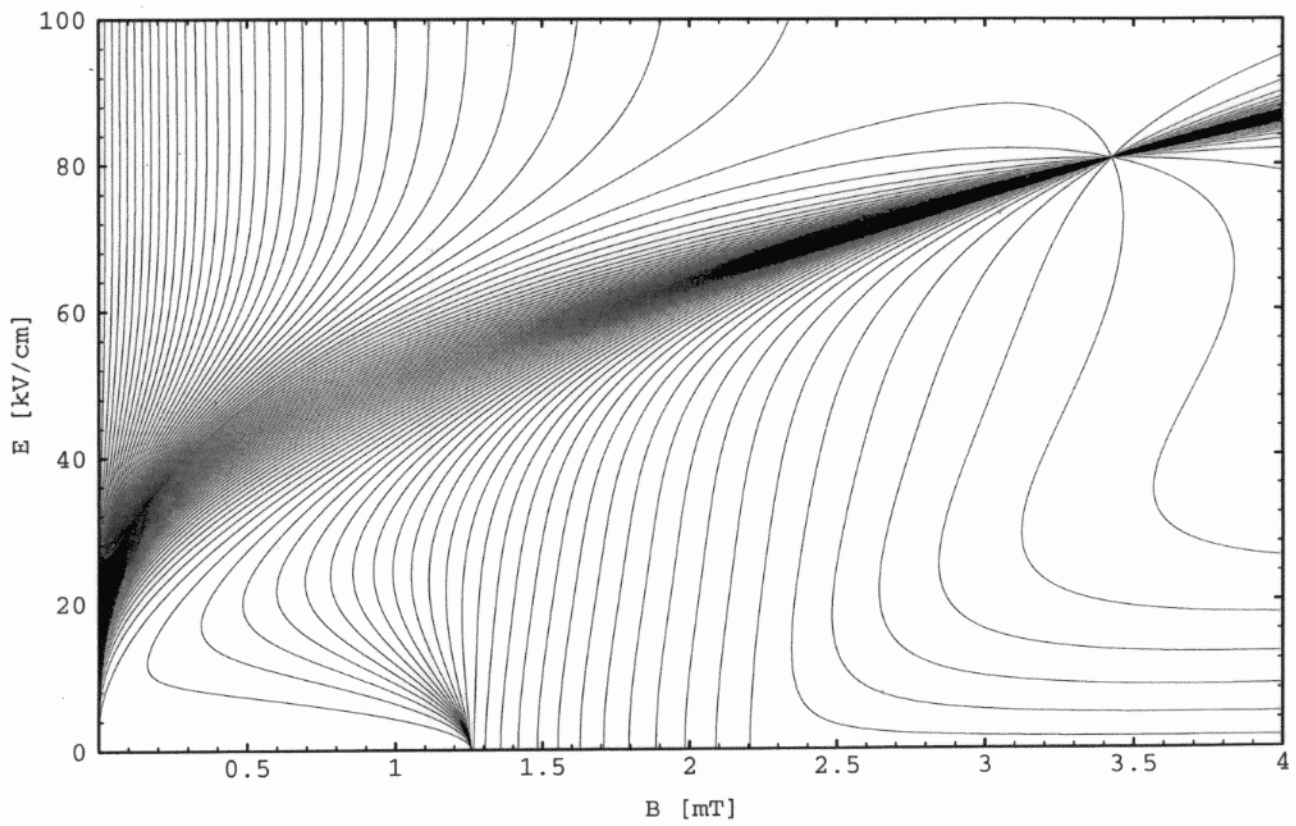
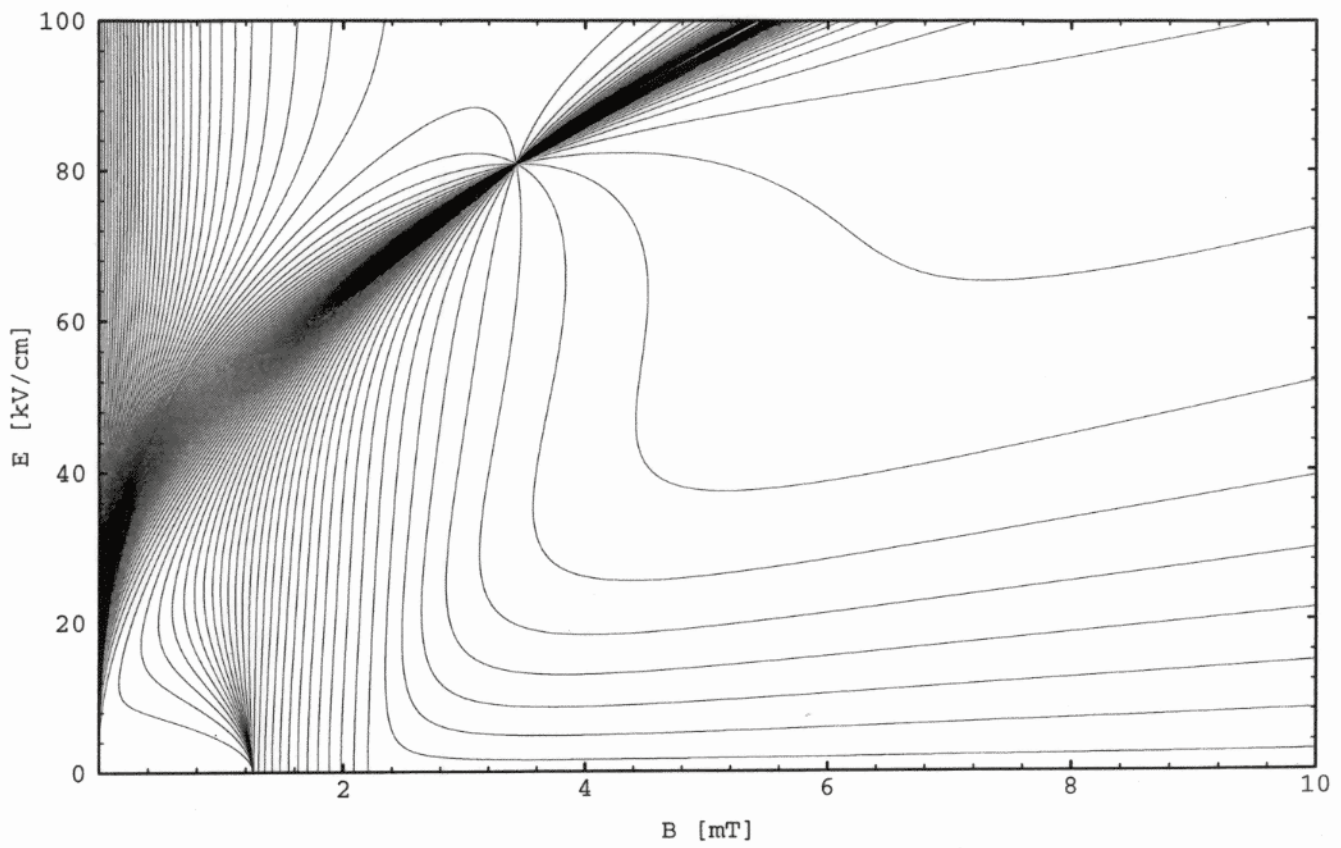


Abb. 7.7a: Liniensystem des rotationsfreien Eigenvektorpaars $(2,0)$, $(2,-2)$ im geraden System, Winkeldifferenz zweier benachbarten Linien: $\pi/128$.

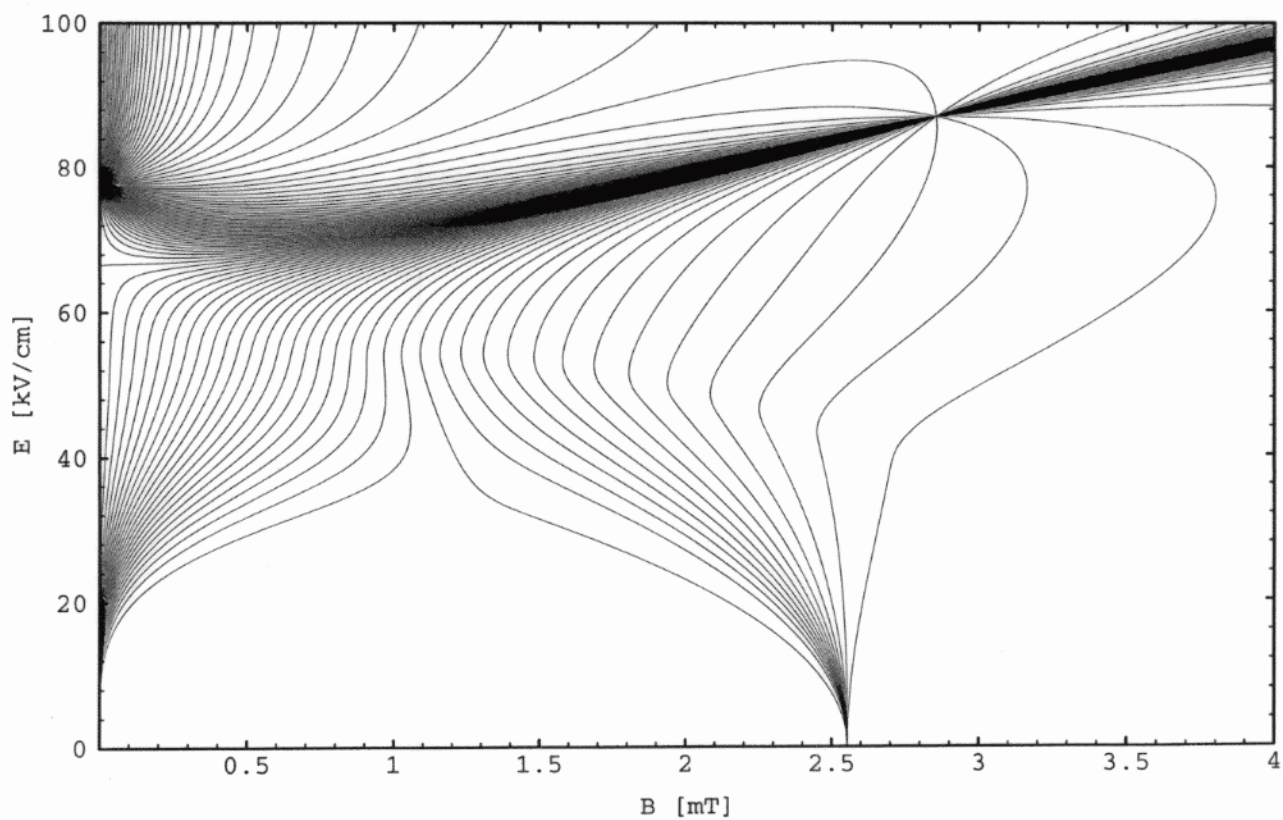
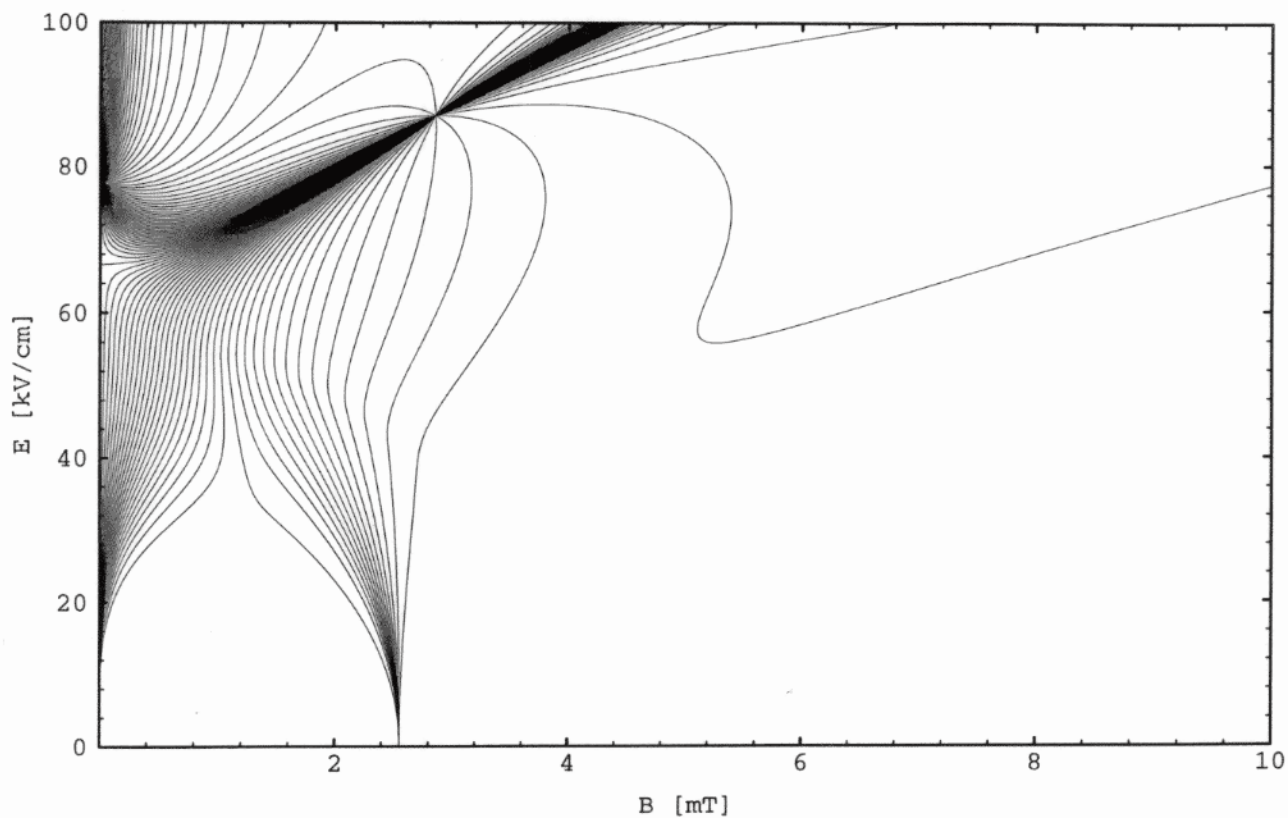


Abb. 7.7b: Liniensystem des rotationsfreien Eigenvektorpaars $(2, 1)$, $(2, -1)$ im ungeraden System. Winkeldifferenz zweier benachbarter Linien: $\pi/128$.

Literaturverzeichnis

- [1] M. E. Musso, Dissertation, Technische Universität Graz (1990)
- [2] M. E. Musso, L. Windholz, *The sodium D_2 line in electric and magnetic fields*; Pt.III: *adiabatic level transfer in perpendicularly crossed fields*. Z.Phys. D30, 13-18 (1994)
- [3] C. Krenn, Diplomarbeit; Technische Universität Graz (1995)
- [4] G. Gwehenberger, Diplomarbeit; Technische Universität Graz (1993)
- [5] A. Lindner, *Drehimpulse in der Quantenmechanik*; Teubner Studienbücher Physik (1984)
- [6] A. R. Edmonds, *Drehimpulse in der Quantenmechanik*; Bibliographisches Institut-Mannheim (1964)
- [7] F. R Gantmacher, *Matrizentheorie*; Springer Verlag, Berlin (1986)
- [8] R. Zurmühl, S. Falk, *Matrizen, Teil 1: Grundlagen*; Springer Verlag (1992)
- [9] R. Zurmühl, S. Falk, *Matrizen und ihre Anwendungen, Teil 2: Numerische Methoden*; Springer Verlag (1986)
- [10] H. R. Schwarz, *Numerische Mathematik*; B. G. Teubner Stuttgart (1988)
- [11] R. W. Schmieder: Am. J. Phys 40, 297 (1972)
- [12] A. Galindo, P. Pascual, *Quantum Mechanics II*; Springer Verlag (1991)
- [13] M. E. Musso, L. Windholz, *Private Mitteilungen* (1995)