Theoretische Physik B, SS 2005

Übungsblatt 7

Besprechung: 20/06/2005

Institut für Theoretische Festkörperphysik
Prof. Dr. Gerd Schön, Dr. Alexander Shnirman (11/03, Tel.: 608-6030)
http://www-tfp.physik.uni-karlsruhe.de/~shnirman

1. Drehmatrizen (8 Punkte)
Eine beliebige Drehung kann wie folgt durch die Euler'schen Winkel parametrisiert werden: $D(\varphi, \theta, \psi) = D^z(\varphi) D^{x'}(\theta) D^{z''}(\psi)$, wobei

$$D^z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad D^{x'}(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \quad D^{z''}(\psi) = \begin{pmatrix} \cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{1}$$

(1a) (2 Punkte) Finden Sie durch explizite Matrixmultiplikation die Drehmatrix $D(\varphi, \theta, \psi)$.
(1b) (1 Punkt) $D^k(\alpha)$ sei die Drehmatrix für eine Drehung im raumfesten Koordinatensystem durch einen Winkel α um die k-Achse, für $k = x, y, z$. Geben Sie diese Matrizen explizit an.
(1c) (2 Punkte) Finden Sie [durch Vergleich der Matrizen von (1b) mit dem Ergebnis von (1a) für $D(\varphi, \theta, \psi)$] die Euler'schen Winkel für $D^y(\alpha)$.
(1d) (2 Punkte) $\delta\alpha$ sei ein infinitesimaler Winkel. Entwickeln Sie $D^k(\delta\alpha)$ wie folgt bis zu linear Ordnung in $\delta\alpha$,

$$D^k(\delta\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - i\,\delta\alpha\, L^k \ , \qquad \text{für} \quad k = x, y, z \ , \tag{2}$$

und bestimmen Sie die Matrizen L^k (die Komponenten dieser Matrizen sind rein imaginär).
(1e) (1 Punkt) Zeigen Sie, dass die L^k-Matrizen folgende Relationen erfüllen:

$$L^x L^y - L^y L^x = i L^z \ , \quad L^y L^z - L^z L^y = i L^x \ , \quad L^z L^x - L^x L^z = i L^y \ . \tag{3}$$

2. Winkelgeschwindigkeit mit Euler'schen Winkel (6 Punkte)
Die Bewegungsgleichungen für die Basisvektoren des körperfesten Systems bei Drehung mit der Winkelgeschwindigkeit $\vec{\Omega}$ lauten

$$\dot{\vec{e}}_i(t) = \vec{\Omega}(t) \times \vec{e}_i(t)$$

Andererseits gilt

$$\vec{e}_i(t) = \sum_k \vec{n}_k D_{ki}(t)$$

wobei $D_{ki}(t) = D_{ki}(\phi(t), \theta(t), \psi(t))$ die durch die Euler'schen Winkel gegebene Drehmatrix ist. In der Vorlesung wurde gezeigt, dass die Komponenten des Vektors $\vec{\Omega} = \sum_j \Omega_j \vec{e}_j$ wie folgt ausgedrückt werden können.

$$\Omega_1 = \sum_j D_{j3} \dot{D}_{j2} \ , \ \Omega_2 = \sum_j D_{j1} \dot{D}_{j3} \ , \ \Omega_3 = \sum_j D_{j2} \dot{D}_{j1} \ .$$

Daraus ergibt sich

$$\Omega_1 = \dot\phi \sin\theta \sin\psi + \dot\theta \cos\psi \ , \ \Omega_2 = \dot\phi \sin\theta \cos\psi - \dot\theta \sin\psi \ , \ \Omega_3 = \dot\psi + \dot\phi \cos\theta$$

Beweisen Sie eine dieser Relationen unter Verwendung der Matrix D (siehe (**1a**)).

3. Trägheitstensor eines zweiatomigen Moleküls (6 Punkte)
Betrachten Sie ein Molekül mit zwei Atomen gleicher Masse (m) im Abstand l voneinander in der Diagonalen in der $x - z$ Ebene. Die Positionen der beiden Atome seien $\vec{b}^{(1)} = (l/\sqrt{8})(-1,0,1)$ und $\vec{b}^{(2)} = (l/\sqrt{8})(1,0,-1)$.
(3a) (3 Punkte) Berechnen Sie die Komponenten I_{mn} des Trägheitstensors explizit gemäß der Formel:

$$I_{ij} = \sum_{\alpha=1,2} m_\alpha [\delta_{ij} \vec{b}^{(\alpha)^2} - b_i^{(\alpha)} b_j^{(\alpha)}] \tag{4}$$

(3b) (3 Punkte) Das Ergebnis für I_{mn} in (2a) enthält nicht-diagonale Terme, weil als Basis nicht die Symmetrieachsen (Hauptträgheitsachsen) des Systems verwendet wurden. Intuitiv ist klar, dass eine der Symmetrieachsen gerade die Diagonale $\vec{n} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,0,1)$ sein muss. In einem entsprechend gedrehten orthonormalen System $\vec{e}_x{}'$ $\vec{e}_y{}'$ und $\vec{e}_z{}'$ wird der neue Trägheitstensor I'_{mn} diagonal sein. Das gedrehte System wird aus dem alten System ($\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$ und $\vec{e}_z$) durch eine Drehung $D^y(\pi/4)$ von $\pi/4$ um die y-Achse erhalten, die $\vec{e}_x$ auf $\vec{n}$ abbildet:

$$\vec{e}_i{}' = \vec{e}_j (D^y)_{ji} \qquad \text{wobei} \quad D^y(\pi/4) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Berechnen Sie den neuen (diagonalen) Trägheitstensor im gedrehten Koordinatensystem, gegeben durch

$$I'_{\bar{i}\bar{j}} = (D^{yT})_{\bar{i}i}(\pi/4) I_{ij} (D^y)_{j\bar{j}}(\pi/4) \ . \tag{6}$$

Bemerkung: I'_{ij} ist natürlich genau der Trägheitstensor den man bekommt wenn man die z-Achse des $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$, $\vec{e}_z$ Koordinatensystems entlang derjenigen Symmetrieachse des Molekül, die durch beide Atome läuft, wählt (vergleiche Vorlesung).