Theoretische Physik B, SS 2005

Musterlösung zum 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

1a) Das Produkt der Matrizen $D(\varphi, \theta, \psi) = D^z(\varphi)D^{x'}(\theta)D^{z''}(\psi)$ lautet ausgeschrieben

$$D = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Dies ergibt als Zwischenschritt

$$D = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \cos \theta & \sin \varphi \sin \theta \\ \sin \varphi & \cos \varphi \cos \theta & -\cos \varphi \sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

und schließlich

$$D = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \cos \theta \sin \psi & -\cos \varphi \sin \psi - \sin \varphi \cos \theta \cos \psi & \sin \varphi \sin \theta \\ \sin \varphi \cos \psi + \cos \varphi \cos \theta \sin \psi & -\sin \varphi \sin \psi + \cos \varphi \cos \theta \cos \psi & -\cos \varphi \sin \theta \\ \sin \theta \sin \psi & \sin \theta \cos \psi & \cos \theta \end{pmatrix}$$

1b) Die Matrizen D^x und D^z wurden schon in **(1a)** gegeben,

$$D^z(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad D^x(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}$$

Jetzt bestimmen wir $D^y(\alpha)$. Ein positiver Winkel α beschreibt eine rechthändige Drehung um die y -Achse. Die Transformation bei der Drehung lautet also

$$\vec{e}'_z = \vec{e}_z \cos \alpha + \vec{e}_x \sin \alpha \quad \vec{e}'_x = -\vec{e}_z \sin \alpha + \vec{e}_x \cos \alpha$$

und entsprechende Matrix

$$D^y(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & \sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix}$$

1c) Der Vergleich mit dem Ergebnis von **(1c)** zeigt, dass die Drehung um die y -Achse durch folgende Euler-Winkel erreicht wird $\varphi = \pi/2$, $\theta = \alpha$, und $\psi = -\pi/2$.

1d) Die Matrizen $D^k(\delta\alpha)$ lassen sich entwickeln wie folgt

$$D^x(\delta\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \delta\alpha & -\sin \delta\alpha \\ 0 & \sin \delta\alpha & \cos \delta\alpha \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\delta\alpha \\ 0 & \delta\alpha & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\delta\alpha \\ 0 & \delta\alpha & 0 \end{pmatrix}$$

Also gilt

$$D^x(\delta\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - i\delta\alpha \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

und

$$L^x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Analog erhalten wir

$$L^z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad L^y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

1e) Die "Vertauschungsrelationen" liefern z.B.

$$L^x L^y - L^y L^x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = iL^z$$

2. Winkelgeschwindigkeit mit Euler'schen Winkel

Wir berechnen, z.B., $\Omega_2 = \sum_j D_{j1} \dot{D}_{j3}$. Dazu brauchen wir

$$\begin{pmatrix} D_{11} \\ D_{21} \\ D_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \cos \theta \sin \psi \\ \sin \varphi \cos \psi + \cos \varphi \cos \theta \sin \psi \\ \sin \theta \sin \psi \end{pmatrix}$$

und

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} D_{13} \\ D_{23} \\ D_{33} \end{pmatrix} = \dot{\varphi} \begin{pmatrix} \cos \varphi \sin \theta \\ \sin \varphi \sin \theta \\ 0 \end{pmatrix} + \dot{\theta} \begin{pmatrix} \sin \varphi \cos \theta \\ -\cos \varphi \cos \theta \\ -\sin \theta \end{pmatrix}$$

Multiplizieren ergibt

$$\Omega_2 = \dot{\varphi} \sin \theta \cos \psi - \dot{\theta} \sin \psi$$

3. Trägheitstensor eines zweiatomigen Moleküls

3a) Wir fangen mit I_{xx} an.

$$I_{xx} = \sum_{\alpha=1,2} m_{\alpha} [\vec{b}^{(\alpha)2} - b_x^{(\alpha)2}] = \sum_{\alpha=1,2} m_{\alpha} [b_x^{(\alpha)2} + b_z^{(\alpha)2} - b_x^{(\alpha)2}] = \frac{ml^2}{4}$$

Analog berechnen wir $I_{zz} = I_{xx}$. Da $b_y^{(\alpha)} = 0$ erhalten wir für I_{yy}

$$I_{yy} = \sum_{\alpha=1,2} m_{\alpha} \vec{b}^{(\alpha)2} = \frac{ml^2}{2}$$

Weiterhin gilt

$$I_{xz} = \sum_{\alpha=1,2} m_{\alpha} [-b_x^{(\alpha)} b_z^{(\alpha)}] = \frac{ml^2}{4}$$

und $I_{zx} = I_{xz}$ während $I_{xy} = I_{yx} = I_{zy} = I_{yz} = 0$. Also

$$\hat{I} = \frac{ml^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

3b) Wir berechnen $I' = D^T I D$. Das ergibt

$$I' = \frac{ml^2}{4} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{ml^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Der neue Trägheitstensor ist diagonal. Der Trägheitsmomentum I'_{xx} ist null, weil das Molekül entlang der Achse $\vec{e}_x'$ ausgerichtet ist.