Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 6, 15.01.2013

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 24.01.2013

Aufgabe 14: Rotationen und Spin I
Zeigen Sie unter Verwendung der Pauli-Matrizen, dass

$$D(\hat{n},\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{S}\cdot\hat{n}\varphi} = e^{-\frac{i}{2}\sigma\cdot\hat{n}\varphi} = \mathbf{1}\cos\frac{\varphi}{2} - i\sigma\cdot\hat{n}\sin\frac{\varphi}{2} \ .$$

Drücken Sie das Ergebnis explizit als (2×2)-Matrix mit Hilfe der Koordinaten n_1, n_2 und n_3 von $\hat{n}$ aus.

Aufgabe 15: Rotationen und Spin II
Betrachten Sie die 2×2 Matrix U, die definiert ist als

$$U = \frac{a_0 + i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{a}}{a_0 - i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{a}} \ = \ (a_0 + i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{a})(a_0 - i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{a})^{-1}$$

wobei a_0 eine reelle Zahl und $\mathbf{a}$ ein dreidimensionaler Vektor mit reellen Komponenten a_1, a_2 und a_3 sind.

a) Zeigen Sie, dass U unitär und unimodular, d.h. $\det(U) = 1$, ist.
b) Eine 2×2 unitäre und unimodulare Matrix stellt i.allg. eine Drehung in drei Dimensionen dar. Finden Sie die Drechachse und den Drehwinkel von U, ausgedrückt durch a_0, a_x, a_y und a_z.

   Hinweis: Verwenden Sie das Ergebnis von Aufgabe 14.

Aufgabe 16: Spin 1 Teilchen
Betrachen Sie ein Spin 1 Teilchen. Berechnen Sie die Matrixelemente

$$S_z\,(S_z+\hbar)\,(S_z-\hbar) \quad \text{und} \quad S_x\,(S_x+\hbar)\,(S_x-\hbar) \ .$$

Hinweis: Zur Lösung benutzen Sie die in der Vorlesung angegebenen Matrixelemente (4.63) und (4.68) für $S=1$ und stellen Sie S_x durch S_+ und S_-,

$$S_+ = S_x + iS_y \text{ und } S_- = S_x - iS_y \ ,$$

dar. Schreiben Sie die Operatoren in Form von 3×3 Matrizen und führen Sie Matrixmultiplikationen durch.

bitte wenden!

Zusatzaufgabe 17: Drehimpuls
Nehmen Sie an, dass halbganzzahlige l-Werte für den Bahndrehimpuls erlaubt wären. Von

$$L_+ Y_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\theta,\phi) = 0,$$

kann man ableiten, dass

$$Y_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\theta,\phi) \propto e^{i\frac{\phi}{2}}\sqrt{\sin\theta}.$$

Versuchen Sie nun, $Y_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}(\theta,\phi)$ zu konstruieren,

a) indem Sie L_- auf $Y_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\theta,\phi)$ anwenden,
b) indem Sie $L_- Y_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}(\theta,\phi) = 0$ ausnutzen.

Zeigen Sie, dass die beiden Verfahren widersprüchliche Ergebnisse liefern. (Daraus folgt dann ein Gegenargument gegen halbganzzahlige l-Werte für den Bahndrehimpuls.)