



## Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I Übungsblatt Nr. 6, 07.01.2014

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 21.01.2014

---

### 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  $(2 \times 2)$ -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  $2 \times 2$  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.

- Zeigen Sie, dass  $U$  unitär und unimodular, d.h.  $\det(U) = 1$ , ist.
- Eine  $2 \times 2$  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

Betrachten 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  $S_-$ ,

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

dar. Schreiben Sie die Operatoren in Form von  $3 \times 3$  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.)