



Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 3, 12.01.2016

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 21.01.2016, Raum N24/251

Aufgabe 6: 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 7: 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.

- Zeigen Sie, dass U unitär und unimodular, d.h. $\det(U) = 1$, ist.
- 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: Berechnen Sie U explizit als (2×2) -Matrix und vergleichen Sie es mit dem Ergebnis von Aufgabe 6.

Aufgabe 8: 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 3×3 Matrizen und führen Sie Matrixmultiplikationen durch.

bitte wenden!

Zusatzaufgabe 9: 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.

Benutzen Sie dabei Gleichung (4.87) aus dem Skript:

$$L_{\pm} = -i\hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).$$

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