Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 11, 23.01.2008

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 30.01.2008

Aufgabe 17: 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 18: 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 17.