

Rotationen

Der Unterschied zwischen keiner Drehung
und einer Drehung um 2π

von

Dr. Ralph Hübner

Wesel, Februar 2011 (Rev. Oktober 2023)

Einleitung

Der Anlaß für diese Abhandlung war ein Thread *SU(2) to SO(3), the recipe* in der Newsgroup *sci.physics.research* aus dem Jahr 2002, den ich im April 2010 entdeckt habe und in dem John C. Baez, Emory F. Bunn, Michael Weiss, Oz und andere über Rotationen diskutierten. Einer der Schwerpunkte dieses Threads war die Darstellung von Drehungen durch die Matrixgruppen $SU(2)$ und $SO(3)$ sowie die Tatsache, daß die quantenmechanische Wellenfunktion eines Spin-1/2-Teilchens nicht 2π - sondern 4π -periodisch ist.

Ich bin sicher daß mir die 4π -Periodizität von Spin-1/2-Systemen bereits während meiner Studienzeit Anfang der Achtziger Jahre mitgeteilt wurde, aber mit dem Fortschritt des Physikstudiums schleicht sich eine gewisse Betriebsblindheit ein, die bewirkt, daß seltsame Eigenschaften im Zusammenhang mit Quantenmechanik und Spin kaum noch als bemerkenswert registriert werden. Im obengenannten Thread wird angedeutet daß die 4π -Periodizität von Drehungen im dreidimensionalen Raum eine elementare Eigenschaft ist und sich nicht auf Spinsysteme beschränkt. Erklärt wird dieses Verhalten mit der sog. **Double Cover**-Eigenschaft, welche die Gruppe $SU(2)$ in Bezug auf die Drehgruppe $SO(3)$ besitzt und welche die 4π -Periodizität in herkömmlichen geometrischen Anwendungsfällen als 2π -Periodizität maskiert. Es existieren sogar explizit durchführbare Experimente wie der Diracsche Gürteltrick [6] oder das Spiel „Tangloid“ des dänischen Erfinders und Mathematikers Piet Hein [5], mit welchen sich die 4π - (und nicht 2π -) Periodizität von Rotationen gewisser Objekte im dreidimensionalen Raum demonstrieren läßt.

Dieses Phänomen wollte ich genauer studieren, und die beste Methode etwas zu verstehen ist noch immer vorzugeben man könne es jemandem erklären. Dabei stellte sich heraus daß die Beschreibung von Rotationen gewissermaßen an einem Überangebot geeigneter mathematischer Methoden krankt [7]: Rotationsmatrizen, Quaternionen, die Lie-Gruppe $SO(3)$ mit ihren Darstellungen und ihrer Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$, die Lie-Gruppe $SU(2)$ mit ihren Darstellungen und ihrer Lie-Algebra $\mathfrak{su}(2)$... alle diese Strukturen sind zueinander isomorph oder zumindest lokal isomorph und über auf den ersten Blick verwirrende Querverbindungen miteinander verknüpft. In dem vorliegenden Text werden sie in verschiedenen Kapiteln einzeln vorgestellt. Ich möchte mich der jeweiligen Struktur auf einfache Art nähern und damit die Grundlage für anspruchsvollere Literatur legen, in welcher der für einen Physiker ungewohnte Jargon durchaus eine Verständnisbarriere sein kann.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	i
1 Rotation und Quaternionen	1
1.1 Das Rotationsquaternion	2
1.2 Beispiel für eine zusammengesetzte Drehung	3
2 Rotationen als Darstellung der Gruppe SU(2)	5
2.1 Die Paulimatrizen	6
2.2 Rotation des Ortsvektors	7
3 Rotationen als Elemente der Gruppe SO(3)	11
3.1 Die Drehmatrix	11
3.2 Anschauliche Konstruktion einer allgemeinen Drehung	12
3.3 Drehungen um die Koordinatenachsen	16
3.4 Drehachse und Winkel einer Rotationsmatrix	16
3.5 Die Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ und die Rodrigues-Rotationsformel	19
4 Vergleich der Darstellungen von SU(2) und SO(3)	27
Literaturverzeichnis	29

1 Rotation und Quaternionen

Es ist kein Zufall daß wir uns zu Beginn dieses Textes mit Quaternionen beschäftigen, denn diese waren das Werkzeug der Wahl in einem frühen Versuch, die Eigenschaften von Rotationen auf elegante Weise mit der Algebra spezieller Zahlen zu verknüpfen. Quaternionen wurden ca. 1840 von Sir William Rowan Hamilton als vierdimensionale Verallgemeinerung der komplexen Zahlen eingeführt. Sein Wunsch war die Konstruktion einer Divisionsalgebra für „Triplets“ (Spaltenvektoren im \mathbb{R}^3), d.h. eines Verfahrens, mit dem Vektoren wie Zahlen multipliziert und dividiert werden können. Realisieren ließ sich eine solche Divisionsalgebra zwar nicht für Triplets, wohl aber für Quadruplets in Form der oben angesprochenen Quaternionen

$$\mathbf{Q} = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}; \quad (1.1)$$

die Koeffizienten a , b , c und d sind reell. Die Basisquaternionen \mathbf{i} , \mathbf{j} und \mathbf{k} spielen die gleiche Rolle wie die imaginäre Einheit i bei den komplexen Zahlen, denn sie erweitern die reellen Zahlen in drei unterschiedliche imaginäre Dimensionen. Sie unterliegen den Rechenregeln

$$\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = \mathbf{ijk} = -1, \quad (1.2)$$

woraus sich die Multiplikationstabelle

$$\begin{aligned} \mathbf{ij} &= -\mathbf{ji} = \mathbf{k} \\ \mathbf{jk} &= -\mathbf{kj} = \mathbf{i} \\ \mathbf{ki} &= -\mathbf{ik} = \mathbf{j} \end{aligned} \quad (1.3)$$

ableiten läßt. Die Quaternionen \mathbb{H} bilden wie die reellen und komplexen Zahlen \mathbb{R} und \mathbb{C} eine assoziative Divisionsalgebra, allerdings sind sie im Gegensatz zu reellen und komplexen Zahlen bezüglich der Multiplikation nicht notwendigerweise kommutativ:

$$\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2 \neq \mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_1. \quad (1.4)$$

Dem üblichen Sprachgebrauch folgend bezeichnen wir die Bestandteile eines Quaternionen als

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}[\mathbf{Q}] &= a && \text{Realteil, skalarer Teil} \\ \operatorname{Im}[\mathbf{Q}] &= b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k} && \text{Imaginärteil, Vektorteil.} \end{aligned} \quad (1.5)$$

Ein Quaternion mit verschwindendem Realteil wird **rein** (imaginär) genannt. Analog zu einer konjugiert komplexen Zahl führen wir ein konjugiertes Quaternion \mathbf{Q}^\dagger ein, indem wir das Vorzeichen des Imaginärteils wechseln:

$$\mathbf{Q}^\dagger = a - b\mathbf{i} - c\mathbf{j} - d\mathbf{k}. \quad (1.6)$$

Mit Hilfe des konjugierten Quaternions läßt sich das Absolutquadrat von \mathbf{Q} definieren als

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q}\mathbf{Q}^\dagger &= (a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k})(a - b\mathbf{i} - c\mathbf{j} - d\mathbf{k}) \\
&= a^2 - (b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k})^2 \\
&= a^2 + b^2 + c^2 + d^2 - bc(\mathbf{ij} + \mathbf{ji}) - bd(\mathbf{ik} + \mathbf{ki}) - cd(\mathbf{jk} + \mathbf{kj}) \\
&= a^2 + b^2 + c^2 + d^2,
\end{aligned} \tag{1.7}$$

denn gemäß (1.3) verschwinden die Summen $\mathbf{ij} + \mathbf{ji}$, $\mathbf{ik} + \mathbf{ki}$ und $\mathbf{jk} + \mathbf{kj}$. Dieser Ausdruck ist positiv definit und kann wie das Absolutquadrat einer komplexen Zahl als das Quadrat der Länge des Quaternions aufgefaßt werden.

1.1 Das Rotationsquaternion

Rotationen sind wie Quaternionen nicht kommutativ bezüglich der Multiplikation bzw. der Hintereinanderausführung, und tatsächlich lassen sich Rotationen durch Quaternionen darstellen:

$$\begin{aligned}
\mathbf{R} &= e^{(\theta/2)\mathbf{n}} = \cos(\theta/2) + \sin(\theta/2)\mathbf{n} \\
\mathbf{n} &= n_x\mathbf{i} + n_y\mathbf{j} + n_z\mathbf{k}
\end{aligned} \tag{1.8}$$

Die oben eingeführten Parameter haben folgende Bedeutung:

- θ : Drehwinkel um die Achse mit Normalenvektor \underline{n}
- n_x : x -Komponente des Normalenvektors \underline{n}
- n_y : y -Komponente des Normalenvektors \underline{n}
- n_z : z -Komponente des Normalenvektors \underline{n} .

Die Komponenten n_x , n_y und n_z des Normalenvektors werden auch als „Richtungskosinus“ bezeichnet. Das reine Quaternion \mathbf{n} repräsentiert somit die Drehachse und die erste Gleichung in (1.8) entspricht der Eulerschen Formel, in der die imaginäre Einheit i durch das imaginäre Einheitsquaternion \mathbf{n} ersetzt wurde. Die Exponentialfunktion ist hier als Potenzreihenentwicklung im quaternionischen Argument $(\theta/2)\mathbf{n}$ zu verstehen. Da die Multiplikation von Quaternionen nicht kommutativ ist, sind die bekannten Exponentialgesetze nicht anwendbar und die Exponentialfunktion für Quaternionen zeigt ein ungewohntes Verhalten. Die Hintereinanderausführung zweier Drehungen erfordert z.B. die Verwendung der Baker–Campbell–Haudorff–Formel, die die Kommutatoren der Exponenten miteinbezieht und auf diese Weise unübersichtliche Ausdrücke generiert. Wir werden diesen Punkt nicht weiter verfolgen und uns bei Rechnungen auf die sin/cos–Darstellung beschränken. Aus (1.8) lassen sich die Koeffizienten des Rotationsquaternions ablesen:

$$a = \cos(\theta/2) \quad b = \sin(\theta/2) n_x \quad c = \sin(\theta/2) n_y \quad d = \sin(\theta/2) n_z, \tag{1.9}$$

und da \underline{n} ein Einheitsvektor ist erfüllen sie die Bedingung

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1. \quad (1.10)$$

Rotationen werden offenbar durch Einheitsquaternionen repräsentiert, deren Parameter über die Bedingung (1.10) auf die Oberfläche der vierdimensionalen Einheitskugel $S(3)$ beschränkt werden. Aufgrund der beiden Gleichungen (1.7) und (1.10) gilt

$$\mathbf{R}\mathbf{R}^\dagger = 1, \quad (1.11)$$

was vermuten läßt, daß \mathbf{R}^\dagger die inverse Drehung zu \mathbf{R} beschreibt. Tatsächlich entsteht

$$\mathbf{R}^\dagger = \cos(\theta/2) - \sin(\theta/2) \mathbf{n} \quad (1.12)$$

durch die Transformation

$$\begin{array}{l} \mathbf{n} \Rightarrow \mathbf{n} \\ \theta \Rightarrow -\theta \end{array} \quad \text{oder} \quad \begin{array}{l} \mathbf{n} \Rightarrow -\mathbf{n} \\ \theta \Rightarrow \theta \end{array}, \quad (1.13)$$

d.h. durch Umkehrung des Drehwinkels bei gleicher Achse bzw. durch Umkehrung der Orientierung der Achse bei gleichem Drehwinkel. Die Multiplikation $\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2$ zweier Rotations- bzw. Einheitsquaternionen ergibt wieder ein Rotations- bzw. Einheitsquaternion welches die zusammengesetzte Drehung repräsentiert. Es enthält unübersichtliche Ausdrücke für die resultierende Drehachse und den dazugehörigen Drehwinkel, die wir hier nicht berechnen wollen. Stattdessen betrachten wir ein leicht zu verfolgendes Beispiel.

1.2 Beispiel für eine zusammengesetzte Drehung

Die Idee zu diesem Beispiel stammt aus dem Buch „Gravitation“ [6], in welchem ein ähnliches Gedankenexperiment als Motivation für die Beschreibung von Drehungen durch Quaternionen verwendet wird. Die Abbildung 1.1 zeigt ein Objekt (a), das um den Winkel $\pi/2$ oder 90° um die x -Achse gedreht wird und sich danach in der Position (b) befindet. Eine anschließende Drehung um $\pi/2$ oder 90° um die z -Achse befördert es in die Position (c). Dieser Skizze ist auch zu entnehmen, daß beide Drehungen zusammen einer Drehung um $2/3 \cdot \pi$ oder 120° um die Achse

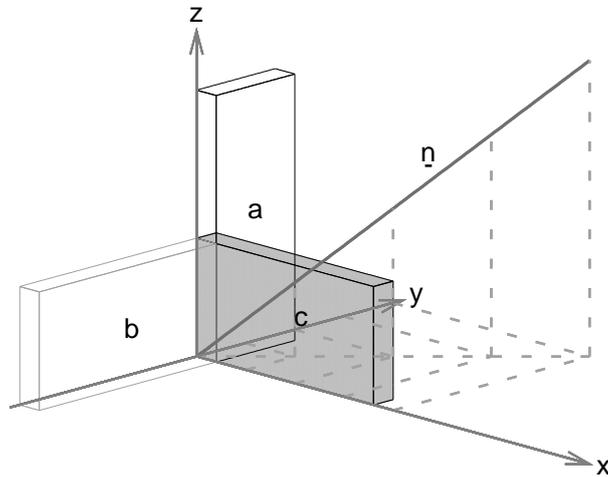
$$\underline{n} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

entlang der Raumdiagonalen entsprechen. Zunächst beschreiben wir die Einzeldrehungen durch folgende Quaternionen:

$$\mathbf{R}_1 = e^{(\pi/4)\mathbf{i}} = \cos(\pi/4) + \sin(\pi/4)\mathbf{i} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \mathbf{i}) \quad (1.15)$$

$$\mathbf{R}_2 = e^{(\pi/4)\mathbf{k}} = \cos(\pi/4) + \sin(\pi/4)\mathbf{k} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \mathbf{k}). \quad (1.16)$$

Abbildung 1.1: Zusammengesetzte Drehung



Tatsächlich wird durch das Produkt der beiden Quaternionen

$$\begin{aligned}
 \mathbf{R}_2 \mathbf{R}_1 &= \frac{1}{2} (1 + \mathbf{i} + \mathbf{k} + \mathbf{ki}) \\
 &= \frac{1}{2} (1 + \mathbf{i} + \mathbf{k} + \mathbf{j}) \\
 &= \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} (\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \\
 &= \cos \frac{\pi}{3} + \sin \frac{\pi}{3} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} (\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \\
 &= \cos \frac{1}{2} \left(\frac{2}{3} \pi \right) + \sin \frac{1}{2} \left(\frac{2}{3} \pi \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} (\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \tag{1.17}
 \end{aligned}$$

die korrekte Achse und der korrekte Winkel für die zusammengesetzte Drehung reproduziert.

2 Rotationen als Darstellung der Gruppe SU(2)

Die Gruppe SU(2) enthält alle unitären (U für unitary) komplexen 2×2– Matrizen (die Zwei) mit der Determinante 1 (S für special). Die konjugiert komplexe und transponierte Version einer unitären Matrix \mathbf{U} ist zugleich ihr Inverses:

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^{T*} =: \mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbb{1}. \quad (2.1)$$

Das Symbol \dagger faßt die beiden Einzeloperationen $*$ (komplexe Konjugation) und T (Transposition) zusammen und unterstreicht somit die Verwandtschaft zu reellen orthogonalen Matrizen \mathbf{R} , die durch

$$\mathbf{R}\mathbf{R}^T = \mathbb{1} \quad (2.2)$$

definiert sind. Außerdem ist \mathbf{U}^\dagger die zu \mathbf{U} adjungierte Matrix bezüglich des Standardskalarproduktes

$$\langle \mathbf{b} | \mathbf{a} \rangle := \sum_{i=1}^2 (b^i)^* a^i \quad (2.3)$$

im Raum \mathbb{C}^2 der zweidimensionalen komplexen Spaltenvektoren. Als adjungierte Matrix erfüllt \mathbf{U}^\dagger die Bedingung

$$\langle \mathbf{b} | \mathbf{U}\mathbf{a} \rangle = U_{ij} (b^i)^* a^j = (U_{ij}^* b^i)^* a^j = \langle \mathbf{U}^\dagger \mathbf{b} | \mathbf{a} \rangle, \quad (2.4)$$

welche wir mit den Zwischenschritten in (2.4) auch gleich bewiesen haben. Zwar begrenzt die Unitaritätseigenschaft (2.1) mögliche Werte der Determinante $\det[\mathbf{U}]$ wegen

$$1 = \det[\mathbb{1}] = \det[\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger] = \det[\mathbf{U}] \det[\mathbf{U}^\dagger] = \det[\mathbf{U}] (\det[\mathbf{U}^T])^* = |\det[\mathbf{U}]|^2 \quad (2.5)$$

bereits auf den komplexen Einheitskreis, die Forderung nach dem speziellen Zahlenwert $\det[\mathbf{U}] = 1$ ist jedoch eine zusätzliche Einschränkung.

Um herauszufinden, wie einzelne Elemente g der Gruppe SU(2) auf einen n –dimensionalen Vektorraum \mathbb{C}^n wirken, ordnet man ihnen komplexwertige $n \times n$ – Matrizen $\rho(g)$ zu. Diese agieren im gewählten Vektorraum als Repräsentanten der Gruppenelemente bzw. als deren Darsteller. Die Gesamtheit dieser $n \times n$ – Matrixrepräsentanten wird diesem Bild folgend als Darstellung bezeichnet. Im Fall der Gruppe SU(2) tragen die Darstellungen ρ_j die Namen „spin – j “ und wirken auf komplexe Vektorräume der Dimension $2j + 1$. Hierbei durchläuft der Index j halbzahlige Werte: $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$. Im Rahmen dieses Textes gibt die Bezeichnung spin – j den Darstellungen nur einen eigenen Namen und der Zusammenhang mit der physikalischen Größe Spin wird nicht weiter vertieft. Jede Darstellung ρ_j der Gruppe SU(2) muß die Gruppenverknüpfung korrekt abbilden und ist somit bezüglich der Multiplikation zu dieser homomorph:

$$\rho_j(g_1 g_2) = \rho_j(g_1) \rho_j(g_2). \quad (2.6)$$

Die Matrixgruppe $SU(2)$ wirkt selbst als Darstellung $\rho_{\frac{1}{2}}$ bzw. $\text{spin} - \frac{1}{2}$ auf den Vektorraum \mathbb{C}^2 . Da Gruppe und Darstellung in diesem Fall identisch sind, wird $\rho_{\frac{1}{2}}$ als Fundamentaldarstellung bezeichnet.

2.1 Die Paulimatrizen

Eine Matrixdarstellung der Rotationsquaternionen muß insbesondere Elemente für die Quaternionenbasis $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ (und 1) bereitstellen, welche den Rechenregeln (1.2) und (1.3) genügen. Geeignete Kandidaten sind die drei Paulimatrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

ergänzt durch die Einheitsmatrix $\mathbb{1}$. Diese Matrizen gehorchen den Rechenregeln

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1} \quad (2.8)$$

und der Multiplikationstabelle

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_y &= -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z \\ \sigma_y \sigma_z &= -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x \\ \sigma_z \sigma_x &= -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Damit haben die Paulimatrizen zunächst nicht die gewünschten Eigenschaften. Multipliziert man sie jedoch mit $-i$, zeigen sie das korrekte Verhalten und wir können die Basisquaternionen darstellen als

$$\mathbf{i} = -i\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{j} = -i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{k} = -i\sigma_z = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Die Determinante dieser Matrizen hat den Wert

$$\det[\mathbf{i}] = \det[\mathbf{j}] = \det[\mathbf{k}] = 1 \quad (2.11)$$

und außerdem sind die Matrizen unitär:

$$\begin{aligned} \mathbf{i} \cdot \mathbf{i}^\dagger &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \mathbb{1} \\ \mathbf{j} \cdot \mathbf{j}^\dagger &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \mathbb{1} \\ \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}^\dagger &= \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = \mathbb{1}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Diese Darstellungen der Basisquaternionen (inklusive der Einheitsmatrix) sind somit Elemente der Gruppe $SU(2)$. Ein allgemeines Quaternion $\mathbf{Q} = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}$ erhält in dieser Schreibweise die Gestalt

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} a - id & -c - ib \\ c - ib & a + id \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

während das hierzu konjugierte Quaternion durch die adjungierte Version

$$\mathbf{Q}^\dagger = \begin{pmatrix} a + id & c + ib \\ -c + ib & a - id \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

repräsentiert wird. Damit entspricht die inverse Drehung nach (2.1) auch der inversen Darstellungsmatrix $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^\dagger$, weswegen das Symbol \dagger widerspruchsfrei sowohl für das konjugierte Rotationsquaternion \mathbf{R}^\dagger als auch für die Adjunktion verwendet werden kann. Zur Überprüfung der Determinante und der Unitarität von (2.13) bilden wir die Ausdrücke

$$\det[\mathbf{Q}] = a^2 + d^2 + b^2 + c^2 \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}\mathbf{Q}^\dagger &= \begin{pmatrix} a - id & -c - ib \\ c - ib & a + id \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a + id & c + ib \\ -c + ib & a - id \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a^2 + d^2 + c^2 + b^2 & 0 \\ 0 & c^2 + b^2 + a^2 + d^2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Falls es sich bei dem Quaternion \mathbf{Q} um ein Rotationsquaternion \mathbf{R} handelt, unterliegen die Koeffizienten nach (1.10) der Bedingung $a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1$, wodurch (2.13) zu einem Mitglied der Matrixgruppe $SU(2)$ wird. Die Paulimatrizen sind somit ein geeignetes Werkzeug, um Einheitsquaternionen mit Elementen der Gruppe $SU(2)$ zu verknüpfen. Letztere eignen sich somit auch zur Darstellung von Rotationen, wodurch für den Rest des Textes sich der Fokus von der Algebra quaternionischer Zahlen auf die Analyse bestimmter Matrixgruppen verschiebt.

2.2 Rotation des Ortsvektors

Es stellt sich nun die Frage, wie genau Rotationen mit der Gruppe $SU(2)$ und ihren Darstellungen zusammenhängen. Den bekannten Rotationsmatrizen des \mathbb{R}^3 am ähnlichsten ist nicht die Fundamentaldarstellung $\text{spin} - \frac{1}{2}$ sondern die Darstellung $\text{spin} - 1$ [2], deren Elemente auf den dreidimensionalen komplexen Vektorraum \mathbb{C}^3 wirken. Die Gruppe $SU(2)$ ist naturgemäß zu jeder ihrer Darstellungen $\text{spin} - j$ homomorph. Wir werden die Rotationsmatrizen des \mathbb{R}^3 als reelle Version der Darstellung $\text{spin} - 1$ auffassen, und somit existiert auch ein Homomorphismus zwischen den Rotationsmatrizen

und der Gruppe $SU(2)$. Im weiteren Verlauf dieses Textes befassen wir uns mit dessen expliziter Konstruktion und werden dabei feststellen, daß dieser Homomorphismus kein Isomorphismus ist. Dieses bedeutet insbesondere, daß beim Übergang von der Gruppe $SU(2)$ zu Rotationsmatrizen gewisse Informationen nicht mit übernommen werden.

Zunächst identifizieren wir das zu drehende Objekt (wir wählen den Ortsvektor \underline{x}) mit einer spurlosen komplexen antihermiteschen 2×2 -Matrix. In Anlehnung an den Normalenvektor \underline{n} der Drehachse schreiben wir den Ortsvektor als reines Quaternion und übertragen dieses mit Hilfe der Paulimatrizen $\{\sigma_i\}$ in den Raum komplexer Matrizen, vgl. (2.10):

$$\mathbf{x} = x \mathbf{i} + y \mathbf{j} + z \mathbf{k} = \begin{pmatrix} -iz & -y - ix \\ y - ix & iz \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Diese Ortsvektormatrix \mathbf{x} ist schief- bzw. antihermitesch und spurfrei, d.h. es gilt

$$\mathbf{x}^\dagger = \mathbf{x}^{T*} = -\mathbf{x} \quad (\text{antihermitesch}) \quad (2.18)$$

$$\text{Tr}[\mathbf{x}] = 0 \quad (\text{spurfrei}). \quad (2.19)$$

Die Wirkung einer unitären Transformation $\mathbf{U} \in SU(2)$ darf die Antihermitezität und die Spurfreiheit von \mathbf{x} nicht verletzen, weil sonst das Resultat der Transformation nicht mehr als Ortsvektor interpretierbar ist. Die Darstellungstheorie der Gruppe $SU(2)$ besagt, daß ihre Elemente in der spin -1 Darstellung wie eine Ähnlichkeitstransformation wirken [1], [2], [8]:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{U} \mathbf{x} \mathbf{U}^{-1}. \quad (2.20)$$

Tatsächlich bleiben die Eigenschaften (2.18) und (2.19) unter der Transformation (2.20) erhalten. Die Antihermitezität ist gesichert wegen

$$\begin{aligned} \mathbf{x}'^\dagger &= (\mathbf{U} \mathbf{x} \mathbf{U}^{-1})^\dagger = (\mathbf{U} \mathbf{x} \mathbf{U}^{T*})^{T*} = (\mathbf{U}^* \mathbf{x}^* \mathbf{U}^T)^T \\ &= (\mathbf{U} \mathbf{x}^{T*} \mathbf{U}^{T*}) = (\mathbf{U} \mathbf{x}^\dagger \mathbf{U}^\dagger) = -\mathbf{U} \mathbf{x} \mathbf{U}^\dagger \\ &= -\mathbf{x}', \end{aligned} \quad (2.21)$$

und für die Spurfreiheit des transformierten Ortsvektors sorgt

$$\text{Tr}[\mathbf{x}'] = \text{Tr}[\mathbf{U} \mathbf{x} \mathbf{U}^{-1}] = \text{Tr}[\mathbf{U}^{-1} \mathbf{U} \mathbf{x}] = \text{Tr}[\mathbf{x}] = 0. \quad (2.22)$$

Neben der Antihermitezität und der Spurfreiheit bleibt bei einer Ähnlichkeitstransformation (2.20) auch die Determinante unverändert, denn es gilt

$$\det[\mathbf{x}'] = \det[\mathbf{U} \mathbf{x} \mathbf{U}^{-1}] = \det[\mathbf{U}] \det[\mathbf{x}] \det[\mathbf{U}^{-1}] = \det[\mathbf{x}]. \quad (2.23)$$

Durch explizite Berechnung der Determinante von (2.17) zeigt sich, daß mit dieser auch die euklidische Länge von \mathbf{x} erhalten bleibt:

$$\det[\mathbf{x}'] = \det[\mathbf{x}] \quad \Rightarrow \quad x'^2 + y'^2 + z'^2 = x^2 + y^2 + z^2. \quad (2.24)$$

Da die Transformation (2.20) die Länge des Ortsvektors nicht ändert, wirkt sie auf die Ortsvektormatrix \mathbf{x} wie eine Drehung.

In einer kurzen Rekapitulation lassen wir den Aufbau des Zusammenhangs zwischen der Gruppe $SU(2)$ und Rotationen noch einmal Revue passieren. Zunächst haben wir die Darstellung $\text{spin} - 1$ als Repräsentation der Gruppe $SU(2)$ im dreidimensionalen komplexen Vektorraum \mathbb{C}^3 eingeführt. Anschließend stellten wir fest, daß sich mit Hilfe der Ortsvektormatrix (2.17) die Wirkung der Darstellung $\text{spin} - 1$ auf den reellen Vektorraum \mathbb{R}^3 beschränken läßt. Damit wird es möglich, die Ähnlichkeitstransformation (2.20) der $\text{spin} - 1$ Darstellung in einer reellen 3×3 - Matrix \mathbf{R} zusammenzufassen. Diese Transformation läßt die euklidische Länge des Ortsvektors unverändert und gehört somit zur Gruppe $SO(3)$. Die Matrix \mathbf{R} ist aus den Koeffizienten einer unitären Transformation $\mathbf{U} \in SU(2)$ aufgebaut und realisiert so den zu Beginn in Aussicht gestellten Homomorphismus zwischen $SU(2)$ und $SO(3)$. Zur Vorbereitung der Berechnung von \mathbf{R} im folgenden Kapitel ermitteln wir zunächst schrittweise den transformierten Vektor \mathbf{x}' :

$$\begin{aligned} \mathbf{x} \mathbf{U}^\dagger &= \begin{pmatrix} -iz & -y - ix \\ y - ix & iz \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a + id & c + ib \\ -c + ib & a - id \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -iz(a + id) + (y + ix)(c - ib) & -iz(c + ib) - (y + ix)(a - id) \\ (y - ix)(a + id) - iz(c - ib) & (y - ix)(c + ib) + iz(a - id) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Die Koeffizienten der abschließenden Matrixmultiplikation $\mathbf{x}' = \mathbf{U} \mathbf{x} \mathbf{U}^\dagger$ sind zu lang, um sie in Matrixform zu bringen. Wir notieren sie deshalb getrennt:

$$\mathbf{x}'_{11} = -i [2(bd - ac)x + 2(cd + ab)y + (a^2 - b^2 - c^2 + d^2)z] \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}'_{12} &= - [2(bc + ad)x + (a^2 - b^2 + c^2 - d^2)y + 2(cd - ab)z] \\ &\quad - i [(a^2 + b^2 - c^2 - d^2)x + 2(bc - ad)y + 2(bd + ac)z] \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}'_{21} &= [2(bc + ad)x + (a^2 - b^2 + c^2 - d^2)y + 2(cd - ab)z] \\ &\quad - i [(a^2 + b^2 - c^2 - d^2)x + 2(bc - ad)y + 2(bd + ac)z] \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\mathbf{x}'_{22} = i [2(bd - ac)x + 2(cd + ab)y + (a^2 - b^2 - c^2 + d^2)z]. \quad (2.29)$$

Aus dem Vergleich dieser Matrixkomponenten mit der Darstellung des rotierten Ortsvektors

$$\mathbf{x}' = \begin{pmatrix} -iz' & -y' - ix' \\ y' - ix' & iz' \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

läßt sich die Transformationsvorschrift für die Ortsvektorkomponenten ablesen:

$$x' = (a^2 + b^2 - c^2 - d^2)x + 2(bc - ad)y + 2(bd + ac)z \quad (2.31)$$

$$y' = 2(bc + ad)x + (a^2 - b^2 + c^2 - d^2)y + 2(cd - ab)z \quad (2.32)$$

$$z' = 2(bd - ac)x + 2(cd + ab)y + (a^2 - b^2 - c^2 + d^2)z. \quad (2.33)$$

Diese Gleichungen führen uns im nächsten Kapitel zur bekannten Darstellung von Rotationen im Raum \mathbb{R}^3 .

3 Rotationen als Elemente der Gruppe $SO(3)$

Die Gruppe $SO(3)$ enthält alle orthogonalen (O für orthogonal) reellen 3×3 -Matrizen (die Drei) mit der Determinante 1 (S für special). Die transponierte Version einer orthogonalen Matrix \mathbf{R} ist zugleich ihr Inverses:

$$\mathbf{R}\mathbf{R}^T = \mathbb{1}. \quad (3.1)$$

Außerdem ist $\mathbf{R}^\dagger = \mathbf{R}^T$ die zu \mathbf{R} adjungierte Matrix bezüglich des Standardskalarproduktes

$$(\underline{b}, \underline{a}) := \sum_{i=1}^3 b^i a^i \quad (3.2)$$

im Raum \mathbb{R}^3 der dreidimensionalen reellen Spaltenvektoren. Als adjungierte Matrix erfüllt \mathbf{R}^\dagger die Bedingung

$$(\underline{b}, \mathbf{R}\underline{a}) = R_{ij} b^i a^j = (\mathbf{R}^\dagger \underline{b}, \underline{a}), \quad (3.3)$$

welche wir mit dem Zwischenschritt in (3.3) auch gleich bewiesen haben. \mathbf{R}^\dagger ist somit der reelle Sonderfall der adjungierten Matrix \mathbf{U}^\dagger aus Kapitel 2, was bedeutet, daß die von uns eingeführten Definitionen von „adjungiert“ für unitäre und orthogonale Matrizen nicht miteinander kollidieren. Zwar begrenzt die Orthogonalitätseigenschaft (3.1) mögliche Werte für die Determinante $\det[\mathbf{R}]$ wegen

$$1 = \det[\mathbb{1}] = \det[\mathbf{R}\mathbf{R}^T] = \det[\mathbf{R}] \det[\mathbf{R}^T] = (\det[\mathbf{R}])^2 \quad (3.4)$$

bereits auf $\det[\mathbf{R}] = \pm 1$, die Forderung nach dem speziellen Zahlenwert $\det[\mathbf{R}] = 1$ ist jedoch eine zusätzliche Einschränkung.

3.1 Die Drehmatrix

Drehungen von Vektoren \underline{x} im Raum \mathbb{R}^3 werden mit Matrizen $\mathbf{R} \in SO(3)$ folgendermaßen durchgeführt:

$$\underline{x}' = \mathbf{R}\underline{x}. \quad (3.5)$$

Daß diese Transformationsvorschrift als reeller Sonderfall der Darstellung $\text{spin} - 1$ der Gruppe $SU(2)$ aufgefaßt werden kann, haben wir bereits im letzten Kapitel erläutert. Als orthogonale Transformation erhält sie die euklidische Länge reeller Vektoren:

$$(\underline{x}', \underline{x}') = (\mathbf{R}\underline{x}, \mathbf{R}\underline{x}) = (\mathbf{R}^T \mathbf{R}\underline{x}, \underline{x}) = (\underline{x}, \underline{x}), \quad (3.6)$$

wobei wir die Orthogonalität von \mathbf{R} im zweiten Schritt von (3.6) ausgenutzt haben. Die Matrix \mathbf{R} ist ein Element der Matrixgruppe $SO(3)$, die selbst als Fundamentaldarstellung auf den Vektorraum \mathbb{R}^3 wirkt.

Aus der Form (2.31)–(2.33) der rotierten Ortsvektormatrix lassen sich die Koeffizienten der $SO(3)$ -Drehmatrix ablesen:

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 - c^2 - d^2 & 2(bc - ad) & 2(bd + ac) \\ 2(bc + ad) & a^2 - b^2 + c^2 - d^2 & 2(cd - ab) \\ 2(bd - ac) & 2(cd + ab) & a^2 - b^2 - c^2 + d^2 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Die Parameter a , b , c und d enthalten den Drehwinkel und die Komponenten der Drehachse wie in (1.9) angegeben

$$a = \cos(\theta/2) \quad b = \sin(\theta/2) n_x \quad c = \sin(\theta/2) n_y \quad d = \sin(\theta/2) n_z, \quad (3.8)$$

womit sie die Bedingung

$$a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1 \quad (3.9)$$

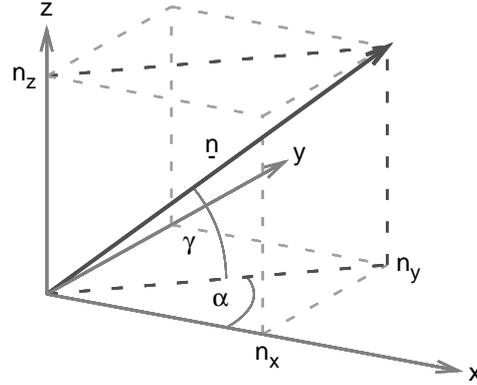
erfüllen. Daß die Matrix (3.7) tatsächlich orthogonal ist und die Determinante 1 besitzt, läßt sich mit etwas Mühe nachrechnen. Wir wählen einen anderen Weg, indem wir die allgemeine Drehung um die Drehachse \underline{n} um den Winkel θ in fünf einfache Einzeloperationen zerlegen, deren Orthogonalität und Determinante offensichtlich ist. Außerdem können wir auf diese Weise zeigen, daß die obenstehende Drehmatrix sich nicht nur mit Hilfe von Quaternionen und der Darstellungstheorie der Gruppe $SU(2)$, sondern auch direkt auf anschauliche Weise herleiten läßt.

3.2 Anschauliche Konstruktion einer allgemeinen Drehung

Eine allgemeine Drehung um die Achse \underline{n} um den Winkel θ kann folgendermaßen in einfache Teilschritte zerlegt werden:

- Drehung des Normalenvektors \underline{n} auf die x -Achse, so daß $\underline{n}' = \underline{e}_x$ gilt
- Durchführung der Drehung um θ , jetzt eine einfach zu beschreibende Drehung um die x -Achse
- Rückdrehung des Systems mit Hilfe der inversen Drehmatrix des ersten Schrittes

Abbildung 3.1: Verlegung der Drehachse



Die Lage der Drehachse \underline{n} lässt sich durch zwei Winkel beschreiben, nämlich den Winkel α zwischen der Projektion von \underline{n} auf die x - y -Ebene und der x -Achse sowie den Winkel γ zwischen \underline{n} und der x - y -Ebene, vgl. Abbildung 3.1. Das Verlegen der Drehachse \underline{n} nach \underline{e}_x kann in zwei aufeinanderfolgenden Schritten durchgeführt werden:

- Drehung des Normalenvektors \underline{n} um die z -Achse um den Winkel $-\alpha$
- Drehung des Normalenvektors \underline{n} um die y -Achse um den Winkel γ

Zunächst bestimmen wir die Winkel α und γ mit Hilfe der Komponenten des Normalenvektors \underline{n} :

$$\left. \begin{array}{ll} \sin \alpha = n_y / \tilde{n} & \cos \alpha = n_x / \tilde{n} \\ \sin \gamma = n_z & \cos \gamma = \tilde{n} \end{array} \right\} \tilde{n} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2}. \quad (3.10)$$

Die erste Drehung $R(\underline{e}_z, -\alpha)$ um die z -Achse um den Winkel $-\alpha$ verlegt die Drehachse \underline{n} in die x - z -Ebene:

$$\mathbf{R}(\underline{e}_z, -\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_x / \tilde{n} & n_y / \tilde{n} & 0 \\ -n_y / \tilde{n} & n_x / \tilde{n} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Die folgende Drehung $R(\underline{e}_y, \gamma)$ um die y -Achse um den Winkel γ verlegt \underline{n} auf die x -Achse:

$$\mathbf{R}(\underline{e}_y, -\gamma) = \begin{pmatrix} \cos \gamma & 0 & \sin \gamma \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \gamma & 0 & \cos \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{n} & 0 & n_z \\ 0 & 1 & 0 \\ -n_z & 0 & \tilde{n} \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Für die beiden Drehmatrizen $R(\underline{e}_z, -\alpha)$ und $R(\underline{e}_y, \gamma)$ sind Orthogonalität und korrekte Determinante leicht zu überprüfen. Dieses gilt auch für die Matrix der eigentlichen Drehung um den Winkel θ , die nun um die x -Achse erfolgt:

$$\mathbf{R}(\underline{e}_x, \theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Der gesamte Drehprozeß einschließlich der Rücktransformation der Drehachse \underline{n} gestaltet sich folgendermaßen:

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta) = \mathbf{R}(\underline{e}_z, \alpha) \mathbf{R}(\underline{e}_y, -\gamma) \mathbf{R}(\underline{e}_x, \theta) \mathbf{R}(\underline{e}_y, \gamma) \mathbf{R}(\underline{e}_z, -\alpha) \quad (3.14)$$

In (3.14) ist zu beachten, daß eine Drehung um den entgegengesetzten Drehwinkel der inversen Drehmatrix entspricht:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\underline{e}_z, \alpha) &= \mathbf{R}^{-1}(\underline{e}_z, -\alpha) = \mathbf{R}^T(\underline{e}_z, -\alpha) \\ \mathbf{R}(\underline{e}_y, \gamma) &= \mathbf{R}^{-1}(\underline{e}_y, -\gamma) = \mathbf{R}^T(\underline{e}_y, -\gamma) \end{aligned} \quad (3.15)$$

Es ist praktisch, zunächst die beiden Drehungen zusammenzufassen, mit denen die Drehachse \underline{n} nach \underline{e}_x verlegt wird:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\underline{n} \Rightarrow \underline{e}_x) &= \mathbf{R}(\underline{e}_y, \gamma) \mathbf{R}(\underline{e}_z, -\alpha) \\ &= \begin{pmatrix} \tilde{n} & 0 & n_z \\ 0 & 1 & 0 \\ -n_z & 0 & \tilde{n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x/\tilde{n} & n_y/\tilde{n} & 0 \\ -n_y/\tilde{n} & n_x/\tilde{n} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z \\ -n_y/\tilde{n} & n_x/\tilde{n} & 0 \\ -n_x n_z/\tilde{n} & -n_y n_z/\tilde{n} & \tilde{n} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Durch Transposition erhalten wir die Drehmatrix der inversen Operation:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\underline{n} \Leftarrow \underline{e}_x) &= \mathbf{R}(\underline{e}_z, \alpha) \mathbf{R}(\underline{e}_y, -\gamma) \\ &= \begin{pmatrix} n_x & -n_y/\tilde{n} & -n_x n_z/\tilde{n} \\ n_y & n_x/\tilde{n} & -n_y n_z/\tilde{n} \\ n_z & 0 & \tilde{n} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Die gesamte Drehung setzt sich aus den Komponenten (3.16), (3.17) und (3.13) zusammen:

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta) = \mathbf{R}(\underline{n} \Leftarrow \underline{e}_x) \mathbf{R}(\underline{e}_x, \theta) \mathbf{R}(\underline{n} \Rightarrow \underline{e}_x). \quad (3.18)$$

Zunächst berechnen wir das Produkt der ersten beiden Matrizen:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\underline{e}_x, \theta) \mathbf{R}(\underline{n} \Rightarrow \underline{e}_x) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z \\ -n_y/\tilde{n} & n_x/\tilde{n} & 0 \\ -n_x n_z/\tilde{n} & -n_y n_z/\tilde{n} & \tilde{n} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z \\ -\cos \theta n_y/\tilde{n} + \sin \theta n_x n_z/\tilde{n} & \cos \theta n_x/\tilde{n} + \sin \theta n_y n_z/\tilde{n} & -\sin \theta \tilde{n} \\ -\cos \theta n_x n_z/\tilde{n} - \sin \theta n_y/\tilde{n} & -\cos \theta n_y n_z/\tilde{n} + \sin \theta n_x/\tilde{n} & \cos \theta \tilde{n} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Das Ergebnis der abschließenden Matrixmultiplikation ist zu lang um es in Matrixform zu bringen, deshalb notieren wir die Komponenten getrennt:

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)_{xx} = \cos^2(\theta/2) + \sin^2(\theta/2) (n_x^2 - n_y^2 - n_z^2) = a^2 + b^2 - c^2 - d^2 \quad (3.20)$$

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)_{xy} = 2 \sin^2(\theta/2) n_x n_y - 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) n_z = 2(bc - ad) \quad (3.21)$$

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)_{xz} = 2 \sin^2(\theta/2) n_x n_z + 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) n_y = 2(bd + ac) \quad (3.22)$$

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)_{yx} = 2 \sin^2(\theta/2) n_x n_y + 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) n_z = 2(bc + ad) \quad (3.23)$$

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)_{yy} = \cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2) (n_x^2 - n_y^2 + n_z^2) = a^2 - b^2 + c^2 - d^2 \quad (3.24)$$

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)_{yz} = 2 \sin^2(\theta/2) n_y n_z - 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) n_x = 2(cd - ab) \quad (3.25)$$

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)_{zx} = 2 \sin^2(\theta/2) n_x n_z - 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) n_y = 2(bd - ac) \quad (3.26)$$

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)_{zy} = 2 \sin^2(\theta/2) n_y n_z + 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) n_x = 2(cd + ab) \quad (3.27)$$

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)_{zz} = \cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2) (n_x^2 + n_y^2 - n_z^2) = a^2 - b^2 - c^2 + d^2 \quad (3.28)$$

Bei der Berechnung wurden die Beziehungen $\tilde{n}^2 + n_z^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$ sowie die trigonometrischen Rechenregeln

$$\begin{aligned} \cos \theta &= \cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2) \\ \sin \theta &= 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) \end{aligned} \quad (3.29)$$

angewandt. Tatsächlich reproduziert die Matrixform von (3.20)–(3.28) wie erhofft die aus der Darstellung spin – 1 der Gruppe SU(2) abgeleitete Rotationsmatrix

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta) = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 - c^2 - d^2 & 2(bc - ad) & 2(bd + ac) \\ 2(bc + ad) & a^2 - b^2 + c^2 - d^2 & 2(cd - ab) \\ 2(bd - ac) & 2(cd + ab) & a^2 - b^2 - c^2 + d^2 \end{pmatrix}, \quad (3.30)$$

die sich somit auch durch ein anschauliches geometrisches Verfahren herleiten läßt. Insbesondere zeigt sich, daß der in der Quaternionendarstellung (1.8) auftretende halbe Drehwinkel $\theta/2$ kein willkürliches Element ist sondern die Folge einer elementaren geometrischen Konstruktion. Hamilton selbst schrieb die Rotationsquaternionen irrtümlicherweise mit dem vollen Drehwinkel(!), obwohl Olinde Rodrigues zu dieser Zeit bereits die korrekte Achse– Winkel– Darstellung einer Rotation mit halbem Drehwinkel veröffentlicht hatte [3].

3.3 Drehungen um die Koordinatenachsen

Zur abschließenden Überprüfung der Rotationsmatrix (3.30) zeigen wir, daß diese die bekannten Drehungen um die Koordinatenachsen als Spezialfall enthält. Bei der Berechnung der Koeffizienten verwenden wir die Gleichungen (3.29) für die Auflösung der Halbwinkel und erhalten:

$$\mathbf{R}(\underline{e}_x, \theta) = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 - b^2 & -2ab \\ 0 & 2ab & a^2 - b^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ 0 & \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

$$\mathbf{R}(\underline{e}_y, \theta) = \begin{pmatrix} a^2 - c^2 & 0 & 2ac \\ 0 & a^2 + c^2 & 0 \\ -2ac & 0 & a^2 - c^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & 0 & \sin(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta) & 0 & \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

$$\mathbf{R}(\underline{e}_z, \theta) = \begin{pmatrix} a^2 - d^2 & -2ad & 0 \\ 2ad & a^2 - d^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 + d^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) & 0 \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

Die Antisymmetrie dieser drei Rotationsmatrizen entstammt nicht der Ausgangsform (3.30) und ist offenbar eine besondere Eigenschaft der Gruppe $SO(2)$. Die korrekte Reproduktion dieser drei Spezialfälle läßt die Darstellung (3.30) einer allgemeinen Rotation in der Gruppe $SO(3)$ weiterhin plausibel erscheinen.

3.4 Drehachse und Winkel einer Rotationsmatrix

Bisher ging es darum, aus den physikalischen Parametern \underline{n} und θ die zugehörige orthogonale Rotationsmatrix $\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)$ zu generieren. Nun wollen wir stattdessen die physikalischen Parameter \underline{n} und θ aus einer gegebenen orthogonalen Matrix $\mathbf{R}\mathbf{R}^T = \mathbb{1}$ extrahieren, deren Elemente uns nur in Form numerischer Werte vorliegen. Zunächst bestimmen wir aus der Spur $\text{Tr}[\mathbf{R}]$ den Drehwinkel indem wir uns die Darstellung (3.30) zunutze machen:

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)] &= 3a^2 - b^2 - c^2 - d^2 \\ &= 3\cos^2(\theta/2) - (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\sin^2(\theta/2) \\ &= 3\cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2) \\ &= 1 + 2(\cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2)) \\ &= 1 + 2\cos(\theta). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Im letzten Schritt haben wir den Vollwinkel θ erneut mit Hilfe der trigonometrischen Beziehungen (3.29) eingeführt. Damit kann der Drehwinkel aus der Spur der Rotationsmatrix berechnet werden:

$$\cos(\theta) = \frac{1}{2} \left(\text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)] - 1 \right). \quad (3.35)$$

Die Komponenten n_i des Richtungsvektors der Rotationsachse lassen sich leicht aus den Nichtdiagonalelementen von (3.30) isolieren:

$$R_{32} - R_{23} = 4ab = 4n_x \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) \quad (3.36)$$

$$R_{13} - R_{31} = 4ac = 4n_y \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) \quad (3.37)$$

$$R_{21} - R_{12} = 4ad = 4n_z \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) \quad (3.38)$$

Die trigonometrischen Funktionen des Halbwinkels $\theta/2$ können mit Hilfe von (3.8) in die Parameter a – d umgerechnet werden:

$$\cos^2(\theta/2) = a^2, \quad \sin^2(\theta/2) = b^2 + c^2 + d^2. \quad (3.39)$$

Die beiden bereits bekannten Beziehungen

$$3a^2 - b^2 - c^2 - d^2 = \text{Tr}[\mathbf{R}] \quad (3.40)$$

$$a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1 \quad (3.41)$$

erlauben uns die Winkelfunktionen in (3.39) als Funktionen der Spur $\text{Tr}[\mathbf{R}]$ darzustellen:

$$\cos^2(\theta/2) = \frac{1}{4} \left(1 + \text{Tr}[\mathbf{R}] \right), \quad \sin^2(\theta/2) = \frac{1}{4} \left(3 - \text{Tr}[\mathbf{R}] \right). \quad (3.42)$$

Mit den obenstehenden Beziehungen können wir den trigonometrischen Anteil der Gleichungen (3.36)–(3.38) schreiben als

$$4 \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) = \sqrt{(1 + \text{Tr}[\mathbf{R}])(3 - \text{Tr}[\mathbf{R}])}, \quad (3.43)$$

und wir erhalten schließlich

$$n_x = \frac{R_{32} - R_{23}}{\sqrt{(1 + \text{Tr}[\mathbf{R}])(3 - \text{Tr}[\mathbf{R}])}} \quad (3.44)$$

$$n_y = \frac{R_{13} - R_{31}}{\sqrt{(1 + \text{Tr}[\mathbf{R}])(3 - \text{Tr}[\mathbf{R}])}} \quad (3.45)$$

$$n_z = \frac{R_{21} - R_{12}}{\sqrt{(1 + \text{Tr}[\mathbf{R}])(3 - \text{Tr}[\mathbf{R}])}}. \quad (3.46)$$

Auch wenn wir in der Lage waren, die physikalischen Parameter n_i und θ als Funktionen der Matrixelemente R_{ij} aus der allgemeinen Form (3.30) „brute force“ zu berechnen, wollen wir nicht verschweigen, dass es elegantere Methoden zur Ermittlung der Drehachse und des Drehwinkels gibt. Eine allgemeine Rotation $\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)$ läßt sich beispielsweise auf die spezielle Rotation um \underline{e}_x zurückführen, womit wir den Drehwinkel einfacher aus (3.31) ermitteln können. Zu diesem Zweck teilen wir die Rotation \mathbf{R} in drei Teilrotationen auf:

$$\mathbf{R}(\underline{n}, \theta) =: \mathbf{R}_{\underline{n}}^T \mathbf{R}(\underline{e}_x, \theta) \mathbf{R}_{\underline{n}} \quad (3.47)$$

(Ausrichtung \underline{e}_x parallel zu \underline{n} , Rotation um die x -Achse, Rückdrehung des Koordinatensystems). Innerhalb einer Spur können die Matrixfaktoren zyklisch vertauscht werden, und wir erhalten

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)] &= \text{Tr}[\mathbf{R}_{\underline{n}}^T \mathbf{R}(\underline{e}_x, \theta) \mathbf{R}_{\underline{n}}] \\ &= \text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{e}_x, \theta) \mathbf{R}_{\underline{n}} \mathbf{R}_{\underline{n}}^T] \\ &= \text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{e}_x)], \end{aligned} \quad (3.48)$$

denn $\mathbf{R}_{\underline{n}}$ ist selbst eine Drehung und somit orthogonal. Daß die Spur einer allgemeinen Rotationsmatrix gleich der Spur von Rotationsmatrizen um die Koordinatenachsen mit gleichem Drehwinkel ist, erscheint daher plausibel. Diese Berechnung des Winkels θ aus der Spur der Rotationsmatrix ähnelt dem Verfahren, mit dem sich aus einer numerisch gegebenen Lorentztransformation die Rapidität und somit die zugrundeliegende Relativgeschwindigkeit der Koordinatensysteme ermitteln läßt [9], [4]. Die Beziehung (3.35) ist die analoge Formel für Rotationen.

Als Vorbereitung für eine einfache Berechnung der Drehachse \underline{n} zerlegen wir die Rotationsmatrix \mathbf{R} in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Teil den wir als \mathbf{R}_S bzw. \mathbf{R}_A bezeichnen:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \mathbf{R}_S + \mathbf{R}_A \\ \mathbf{R}_S &= \frac{1}{2}[\mathbf{R} + \mathbf{R}^T] \\ \mathbf{R}_A &= \frac{1}{2}[\mathbf{R} - \mathbf{R}^T]. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Wir können diese Definition von \mathbf{R}_A verwenden um die Gleichungen (3.36)–(3.38) folgendermaßen umzuschreiben:

$$[\mathbf{R}_A]_{32} = 2n_x \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) \quad (3.50)$$

$$[\mathbf{R}_A]_{13} = 2n_y \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) \quad (3.51)$$

$$[\mathbf{R}_A]_{21} = 2n_z \cos(\theta/2) \sin(\theta/2). \quad (3.52)$$

In Matrixform geschrieben erhalten wir:

$$2 \mathbf{R}_A = \mathbf{R} - \mathbf{R}^T = 4 \mathbf{n} \cos(\theta/2) \sin(\theta/2)$$

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.53)$$

Verzichtet man auf die Normierung von \underline{n} läßt sich eine nicht normierte Version $\tilde{\underline{n}}$ des Richtungsvektors leicht aus den Komponenten von \mathbf{R} ableiten:

$$\tilde{n}_x := R_{32} - R_{23} \quad \tilde{n}_y := R_{13} - R_{31} \quad \tilde{n}_z := R_{21} - R_{12}. \quad (3.54)$$

Da nur der symmetrische Teil \mathbf{R}_S die Spur der Drehmatrix enthält könnte man überspitzt formulieren:

- Der Drehwinkel wird vom symmetrischen Teil \mathbf{R}_S der Drehmatrix bestimmt
- Die Drehachse wird vom antisymmetrischen Teil \mathbf{R}_A der Drehmatrix festgelegt

Zum Schluß fassen wir noch einmal die Gleichungen zusammen die wir für die numerische Berechnung des Drehwinkels θ und der Drehachse \underline{n} aus den Matrixelementen \mathbf{R}_{ij} hergeleitet haben:

$$\cos(\theta) = \frac{1}{2} \left(\text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)] - 1 \right) \quad (3.55)$$

$$n_x = \frac{R_{32} - R_{23}}{\sqrt{(1 + \text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)])(3 - \text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)])}} \quad (3.56)$$

$$n_y = \frac{R_{13} - R_{31}}{\sqrt{(1 + \text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)])(3 - \text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)])}} \quad (3.57)$$

$$n_z = \frac{R_{21} - R_{12}}{\sqrt{(1 + \text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)])(3 - \text{Tr}[\mathbf{R}(\underline{n}, \theta)])}}. \quad (3.58)$$

3.5 Die Lie–Algebra $\mathfrak{so}(3)$ und die Rodrigues–Rotationsformel

Gruppen, deren Elemente mit Hilfe reeller Parameter kontinuierlich durchfahren werden können, werden nach dem Mathematiker Sophus Lie als Lie–Gruppen bezeichnet. Wir haben bereits gesehen, daß wir für die Drehgruppe drei reelle Parameter benötigen,

seien es die drei Eulerschen Winkel oder die beiden Richtungsparameter einer Drehachse und den Drehwinkel. Die Gruppe $SO(3)$, mit deren Elementen wir im letzten Abschnitt Rotationen dargestellt haben, ist somit eine 3-dimensionale Lie-Gruppe.

Zu jeder Lie-Gruppe gehört eine Lie-Algebra derselben Dimension. Diese Lie-Algebra ist selbst keine Gruppe sondern ein Vektorraum mit einer zusätzlichen schiefsymmetrischen binären Verknüpfung, die als Lie-Klammer bezeichnet wird. Letztere wird durch $[\cdot, \cdot]$ symbolisiert und besitzt folgende Eigenschaften:

$$[U, V] = -[V, U] \quad (3.59)$$

$$[U, sV + tW] = s[U, V] + t[U, W] \quad (3.60)$$

$$[U, [V, W]] + [V, [W, U]] + [W, [U, V]] = 0. \quad (3.61)$$

Hierbei sind U, V und W Elemente der Lie-Algebra, während es sich bei s und t um Zahlenfaktoren handelt. Die Gleichungen (3.59) und (3.60) beschreiben Schiefsymmetrie und Linearität der Lie-Klammer, die durch die Jacobi-Identität (3.61) ergänzt werden. Die nun folgende Analyse von Drehungen mit Hilfe der Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ der Rotationsgruppe ist angelehnt an das Kapitel über Lie-Gruppen und Lie-Algebren des auch sonst sehr zu empfehlenden Lehrbuchs [2].

Die Abbildung „exp“ generiert aus den Elementen J einer Lie-Algebra Elemente G der zugehörigen Lie-Gruppe. Sie besitzt die folgenden Eigenschaften:

$$\exp(0) = \mathbb{1} \quad (3.62)$$

$$\exp(sJ) \exp(tJ) = \exp((s+t)J) \quad (3.63)$$

$$\left. \frac{d}{dt} \exp(tJ) \right|_{t=0} = J. \quad (3.64)$$

Im Fall der Lie-Gruppe $SO(3)$ sind sowohl G als auch J Matrizen, und die zwischen Lie-Algebra und Lie-Gruppe vermittelnde Abbildung exp ist tatsächlich die über ihre Potenzreihenentwicklung definierte Exponentialfunktion:

$$G(t) = e^{tJ} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (tJ)^k \quad \text{mit } t \in \mathbb{R}. \quad (3.65)$$

Der obenstehende Ausdruck beschreibt eine Kurve innerhalb der Lie-Gruppe, welche für den Parameterwert $t = 0$ das Einselement $G = 1$ durchläuft. Die Abbildung exp überträgt die Eigenschaften der Lie-Gruppe auf die Lie-Algebra; so findet beispielsweise die Multiplikation zweier Gruppenmitglieder ihr Gegenstück in der Addition der zugehörigen Algebraelemente. Für gewöhnlich besteht die Lie-Algebra aus einer einfacheren Klasse von Objekten als die zugrundeliegende Lie-Gruppe, was den Übergang zur Lie-Algebra beim Studium der Gruppenstruktur sinnvoll erscheinen läßt. Hierbei spiegelt sich insbesondere die Vertauschbarkeit der Gruppenmultiplikation in den

Eigenschaften der Algebraverknüpfung $[\cdot, \cdot]$ wider, weswegen die Lie-Klammer der Basisvektoren J_i und die daraus abgeleiteten Strukturkoeffizienten C_{ij}^k von besonderem Interesse sind. Hierbei wird das Resultat von $[J_i, J_j]$ wieder in der Basis $\{J_i\}$ aufgespannt:

$$[J_i, J_j] = C_{ij}^k J_k. \quad (3.66)$$

Ist die Parametrisierung einer Lie-Gruppe stetig differenzierbar, kann diese als Differenzierbare Mannigfaltigkeit aufgefaßt werden. Unter diesem Aspekt verhalten sich Lie-Gruppe und Lie-Algebra wie eine Mannigfaltigkeit und der Tangentialvektorraum eines ihrer Punkte. Die lokalen Eigenschaften von Mannigfaltigkeiten und Lie-Gruppen sind in allen Punkten gleich, weshalb man sich auf die Diskussion der Lie-Algebra des Gruppenelementes $G = \mathbb{1}$ beschränkt. Von dieser Vorstellung ausgehend ist es naheliegend, daß die Differentiation der Kurve (3.65) nach dem Parameter t an der Stelle des Einselementes $t = 0$ gewissermaßen als Tangentialvektor ein Element der Lie-Algebra produziert:

$$\left. \frac{d}{dt} G(t) \right|_{t=0} = \left. \frac{d}{dt} e^{tJ} \right|_{t=0} = J. \quad (3.67)$$

Wir werden nun auf die speziellen Eigenschaften der für Rotationen zuständigen Lie-Gruppe $SO(3)$ und deren Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ näher eingehen. Die orthogonalen Matrizen \mathbf{R} der Gruppe $SO(3)$ erfüllen

$$\mathbf{R}^T \mathbf{R} = \mathbb{1}. \quad (3.68)$$

Betrachten wir eine Kurve von Drehmatrizen der Gestalt

$$\mathbf{R}(t) = e^{tJ} \quad (3.69)$$

und differenzieren die Beziehung (3.68) an der Stelle $t = 0$, erhalten wir

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} \mathbf{R}(t)^T \mathbf{R}(t) \right|_{t=0} &= \left. \frac{d}{dt} \mathbf{R}(t)^T \cdot \mathbf{R}(t) \right|_{t=0} + \mathbf{R}(t)^T \cdot \left. \frac{d}{dt} \mathbf{R}(t) \right|_{t=0} \\ &= J^T \cdot \mathbb{1} + \mathbb{1} \cdot J = 0 \end{aligned} \quad (3.70)$$

$$\Rightarrow J^T = -J, \quad (3.71)$$

was bedeutet, daß J schiefssymmetrisch ist. Zusammengefaßt haben wir also

$$SO(3): \text{ Orthogonale } 3 \times 3\text{-Matrizen} \quad (3.72)$$

$$\mathfrak{so}(3): \text{ Schiefssymmetrische } 3 \times 3\text{-Matrizen} \quad (3.73)$$

Diese Eigenschaften sind mit dem Gruppen- bzw. Vektorraumcharakter von $SO(3)$ und $\mathfrak{so}(3)$ verträglich:

- Orthogonale Matrizen sind unter der Matrixmultiplikation abgeschlossen und bilden eine Gruppe. Für das Produkt zweier orthogonaler Matrizen A und B gilt nämlich

$$(AB)^T AB = B^T A^T AB = B^T B = \mathbf{1}. \quad (3.74)$$

Linearkombinationen orthogonaler Matrizen sind dagegen im Allgemeinen nicht wieder orthogonal, weshalb orthogonale Matrizen zwar eine Gruppe, aber keinen Vektorraum bilden.

- Das Produkt schiefsymmetrischer Matrizen ist selbst nicht schiefsymmetrisch. Für schiefsymmetrische Matrizen A und B gilt vielmehr

$$(AB)^T = B^T A^T = BA \neq -AB. \quad (3.75)$$

Damit ist die Matrixmultiplikation innerhalb der Menge der schiefsymmetrischen Matrizen keine geschlossene Operation, weshalb diese auch keine Gruppe bilden können. Linearkombinationen schiefsymmetrischer Matrizen hingegen bleiben schiefsymmetrisch und spannen somit einen Vektorraum auf. Die Lie-Klammer hat für Matrizen die Form eines Kommutators, so daß auch die Algebraoperation nicht aus der Klasse der schiefsymmetrischen Matrizen herausführt:

$$[A, B]^T = (AB)^T - (BA)^T = B^T A^T - A^T B^T = -[A, B]. \quad (3.76)$$

Schiefsymmetrische Matrizen sind bezüglich der Lie-Klammer eine Vektorraum-Algebra, sie bilden aber bezüglich der Matrixmultiplikation keine Gruppe.

Als nächstes suchen wir eine Basis für die Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$. Hierfür eignen sich die Drehungen um die Koordinatenachsen (3.31), (3.32) und (3.33), aus denen sich eine Basis für $\mathfrak{so}(3)$ durch Differentiation berechnen läßt:

$$J_x = \left. \frac{d}{dt} \mathbf{R}(\underline{e}_x, t) \right|_{t=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.77)$$

$$J_y = \left. \frac{d}{dt} \mathbf{R}(\underline{e}_y, t) \right|_{t=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.78)$$

$$J_z = \left. \frac{d}{dt} \mathbf{R}(\underline{e}_z, t) \right|_{t=0} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.79)$$

Diese Wahl von Basisvektoren ist im Raum schiefsymmetrischer 3×3 – Matrizen ohnehin naheliegend. Durch explizites Nachrechnen können wir die Lie-Klammern der

Basisvektoren und damit auch die Strukturkoeffizienten der Lie–Algebra $\mathfrak{so}(3)$ angeben:

$$\left. \begin{array}{l} [J_x, J_y] = J_z \\ [J_y, J_z] = J_x \\ [J_z, J_x] = J_y \end{array} \right\} \Rightarrow C_{ij}^k = \begin{cases} 1 & i j k \text{ gerade Permutation von } x y z \\ -1 & i j k \text{ ungerade Permutation von } x y z \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.80)$$

Da sich durch Linearkombination der J_x , J_y und J_z und anschließender Anwendung der Exponentialabbildung die gesamte Drehgruppe erzeugen läßt, werden diese Basisvektoren auch als Generatoren der Drehgruppe $SO(3)$ bezeichnet. Wir bilden diese Linearkombinationen auf eine spezielle Weise:

$$t \mathbf{n} := t(n_x J_x + n_y J_y + n_z J_z) \quad \text{mit} \quad n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1. \quad (3.81)$$

Ko– und kontravariante Komponenten spielen in diesem Text keine Rolle, und um die Schreibweise einheitlich zu halten, belassen wir es bei untenstehenden Indizes. Das so definierte \mathbf{n} ist eine Darstellung des Normalenvektors der Drehachse, welche mit dem Drehwinkel t als reellem Parameter kombiniert wird. Die Lie–Algebra $\mathfrak{so}(3)$ beschreibt eine Drehung somit als Achse– Winkel– Konstruktion zusammengefaßt in einer schiefssymmetrischen Matrix. In dem gut lesbaren Artikel über Lie–Gruppen und Lie–Algebren [7] vergleicht Michael Weiss die Elemente von $\mathfrak{so}(3)$ mit Winkelgeschwindigkeiten, also einer Variation des Achse– Winkel– Konzeptes.

Wie schon in Kapitel 1 ist bei der nun folgenden Anwendung der Matrix–Exponentialfunktion zu beachten, daß die elementaren Exponentialgesetze nur für Exponenten gelten, die miteinander kommutieren und daß ansonsten mit der Potenzreihenentwicklung (3.65) gearbeitet werden muß. Eine allgemeine Drehung um die Achse \underline{n} um den Winkel t hat somit die Gestalt

$$\mathbf{R}(\underline{n}, t) = e^{t \mathbf{n}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (t \mathbf{n})^k. \quad (3.82)$$

Es wird sich herausstellen, daß aufgrund von $\mathbf{n}^2 \neq \pm \mathbb{1}$ die Eulerformel (1.8) nicht gilt und daß wir selbst nach einer geschlossenen Matrixform von (3.82) suchen müssen. Für die Berechnung der Potenzen der Drehachse fassen wir zunächst \mathbf{n} zu einer Matrix zusammen:

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.83)$$

Jetzt können die Potenzen von \mathbf{n} durch Matrixmultiplikation bestimmt werden:

$$\mathbf{n}^0 = \mathbb{1} \quad (3.84)$$

$$\mathbf{n}^1 = \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3.85)$$

$$\mathbf{n}^2 = \begin{pmatrix} n_x^2 - 1 & n_x n_y & n_x n_z \\ n_y n_x & n_y^2 - 1 & n_y n_z \\ n_z n_x & n_z n_y & n_z^2 - 1 \end{pmatrix} \quad (3.86)$$

$$\mathbf{n}^3 = \begin{pmatrix} 0 & n_z & -n_y \\ -n_z & 0 & n_x \\ n_y & -n_x & 0 \end{pmatrix} = -\mathbf{n}. \quad (3.87)$$

Bei der Berechnung wurde $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$ ausgenutzt. Es mag auf den ersten Blick widersprüchlich erscheinen, daß zwar $\mathbf{n}^3 = -\mathbf{n}$ gilt, aber nicht gleichzeitig $\mathbf{n}^2 = -\mathbb{1}$. Da jedoch die Determinante von \mathbf{n} verschwindet, ist \mathbf{n} nicht invertierbar, womit aus $\mathbf{n}^3 = -\mathbf{n}$ nicht automatisch $\mathbf{n}^2 = -\mathbb{1}$ folgt. Mit (3.84)–(3.87) sind sämtliche Potenzen der Drehachse bekannt

$$\begin{aligned} \mathbf{n}^0 &= \mathbb{1} \\ \mathbf{n}^{2k+1} &= (-1)^k \mathbf{n} \quad 0 \leq k < \infty \\ \mathbf{n}^{2k} &= (-1)^{k+1} \mathbf{n}^2 \quad 1 \leq k < \infty, \end{aligned} \quad (3.88)$$

und der Ausdruck (3.82) für die Drehmatrix zerfällt in drei Anteile:

$$\mathbf{R}(\underline{n}, t) = \mathbb{1} + \sum_0^{\infty} (-1)^k \frac{t^{2k+1}}{(2k+1)!} \cdot \mathbf{n} + \sum_1^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{t^{2k}}{(2k)!} \cdot \mathbf{n}^2. \quad (3.89)$$

Unter Ausnutzung der Potenzreihenentwicklungen für $\sin(t)$ und $\cos(t)$

$$\sin(t) = \sum_0^{\infty} (-1)^k \frac{t^{2k+1}}{(2k+1)!} \quad (3.90)$$

$$\cos(t) = \sum_0^{\infty} (-1)^k \frac{t^{2k}}{(2k)!} \quad (3.91)$$

können wir schreiben:

$$\mathbf{R}(\underline{n}, t) = \mathbb{1} + \sin(t) \cdot \mathbf{n} + (1 - \cos(t)) \cdot \mathbf{n}^2. \quad (3.92)$$

Zunächst wollen wir untersuchen, ob diese Form der Drehmatrix mit der in (3.30) gefundenen verträglich ist. Analog zu (3.29) führen wir den Halbwinkel $t/2$ ein

$$\begin{aligned} \cos(t) &= \cos^2(t/2) - \sin^2(t/2) \\ \sin(t) &= 2 \sin(t/2) \cos(t/2) \end{aligned} \quad (3.93)$$

und erhalten

$$\mathbf{R}(\underline{n}, t) = \mathbb{1} + 2 \sin(t/2) \cos(t/2) \cdot \mathbf{n} + 2 \sin^2(t/2) \cdot \mathbf{n}^2. \quad (3.94)$$

Wir verwenden auch hier die in (3.8) eingeführten Parameter:

$$\begin{aligned} a &= \cos(t/2) & b &= \sin(t/2) n_x & c &= \sin(t/2) n_y & d &= \sin(t/2) n_z \\ a^2 + b^2 + c^2 + d^2 &= 1. \end{aligned} \quad (3.95)$$

In diesen Parametern erhalten die Anteile von (3.94) die folgende Gestalt:

$$\sin(t/2) \cos(t/2) \cdot \mathbf{n} = \begin{pmatrix} 0 & -ad & ac \\ ad & 0 & -ab \\ -ac & ab & 0 \end{pmatrix} \quad (3.96)$$

$$\sin^2(t/2) \cdot \mathbf{n}^2 = \begin{pmatrix} -c^2 - d^2 & bc & bd \\ cb & -b^2 - d^2 & cd \\ db & dc & -b^2 - c^2 \end{pmatrix}. \quad (3.97)$$

In (3.97) wurde bei der Berechnung der Diagonalelemente erneut $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$ verwendet. Wir können nun alle Anteile der Drehmatrix (3.94) zusammenfassen, wobei wir die im ersten Term auftretenden Einsen mit Hilfe von $1 = a^2 + b^2 + c^2 + d^2$ ebenfalls in den neuen Parametern ausdrücken:

$$\mathbf{R}(\underline{n}, t) = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 - c^2 - d^2 & 2(bc - ad) & 2(bd + ac) \\ 2(bc + ad) & a^2 - b^2 + c^2 - d^2 & 2(cd - ab) \\ 2(bd - ac) & 2(cd + ab) & a^2 - b^2 - c^2 + d^2 \end{pmatrix}. \quad (3.98)$$

Damit haben wir bewiesen, daß die aus der Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ abgeleitete Beschreibung von Rotationen das gleiche Ergebnis liefert wie die in Kapitel 2 vorgestellte Darstellung durch Quaternionen und unitäre Matrizen der Gruppe $SU(2)$.

Zum Abschluß wollen wir die Wirkung der Drehmatrix (3.92) auf einen Vektor \underline{x} genauer untersuchen. Hierfür drücken wir zunächst den Effekt der Potenzen der Drehachse \mathbf{n} und \mathbf{n}^2 auf \underline{x} in elementaren Vektoroperationen aus:

$$\mathbf{n} \underline{x} = \begin{pmatrix} n_y z - n_z y \\ n_z x - n_x z \\ n_x y - n_y x \end{pmatrix} = \underline{n} \times \underline{x} \quad (3.99)$$

$$\mathbf{n}^2 \underline{x} = \begin{pmatrix} (n_x x + n_y y + n_z z) n_x - x \\ (n_x x + n_y y + n_z z) n_y - y \\ (n_x x + n_y y + n_z z) n_z - z \end{pmatrix} = (\underline{n}, \underline{x}) \underline{n} - \underline{x}. \quad (3.100)$$

Diese Ausdrücke setzen wir in (3.92) ein und erhalten als Resultat die Rotationsformel von Olinde Rodrigues [3]:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\underline{n}, t) \underline{x} &= \cos(t) \underline{x} + \sin(t) \underline{n} \times \underline{x} + (1 - \cos(t)) (\underline{n}, \underline{x}) \underline{n} \\ &= \cos(t) (\underline{x} - (\underline{n}, \underline{x}) \underline{n}) + \sin(t) \underline{n} \times \underline{x} + (\underline{n}, \underline{x}) \underline{n}. \end{aligned} \quad (3.101)$$

In der letzten Zeile sieht man, daß der zu \underline{n} parallele Anteil von \underline{x} abgespalten wird und unverändert bleibt, während sich die Wirkung der Rotation auf die Ebene senkrecht zur Drehachse beschränkt. Dementsprechend zerlegen wir den Ortsvektor \underline{x} :

$$\underline{x} = \underline{x}_{\parallel} + \underline{x}_{\perp} \quad (3.102)$$

$$\underline{x}_{\parallel} = (\underline{n}, \underline{x}) \underline{n} \quad (3.103)$$

$$\underline{x}_{\perp} = \underline{x} - (\underline{n}, \underline{x}) \underline{n}. \quad (3.104)$$

Wir definieren nun zwei Basisvektoren \underline{n}_1 und \underline{n}_2 innerhalb der Rotationsebene:

$$\underline{x}_{\perp} \underline{n}_1 := \underline{x}_{\perp} \quad (3.105)$$

$$\underline{x}_{\perp} \underline{n}_2 := \underline{x}_{\perp} \times \underline{n} = \underline{x} \times \underline{n}$$

Mit diesen Vorzeichenkonventionen bildet die Basis $\{\underline{n}_1, \underline{n}_2, \underline{n}\}$ ein Rechtssystem. Nach Einsetzen dieser Definitionen in die Rodrigues-Formel wird die Wirkung der Rotation innerhalb der Drehebene besonders offensichtlich:

$$\mathbf{R}(\underline{n}, t) \underline{x} = [\cos(t) \underline{n}_1 - \sin(t) \underline{n}_2] \underline{x}_{\perp} + \underline{x}_{\parallel}. \quad (3.106)$$

Benjamin Olinde Rodrigues war Politiker, Sozialreformer, Bankier und gelegentlich auch Mathematiker. Er veröffentlichte um 1840 eine Arbeit über Rotationen, welche u.a. die oben erwähnte Formel enthält, wenn auch sicher nicht in der hier verwendeten modernen Vektorschreibweise von Heaviside und Gibbs. Rodrigues hatte ähnlich wie Hamilton das Quaternionenkonzept verwendet, allerdings –im Gegensatz zu Hamilton selbst– mit der korrekten Assoziation von Quaternionen mit Drehungen um den Halbwinkel $t/2$.

4 Vergleich der Darstellungen von $SU(2)$ und $SO(3)$

Zu Beginn dieser Diskussion präsentieren wir alle behandelten Schreibweisen einer Rotation noch einmal auf einen Blick:

$$\mathbf{R}_{[\text{Quat.}]} = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k} \quad (4.1)$$

$$\mathbf{R}_{[SU(2)]} = \begin{pmatrix} a - id & -c - ib \\ c - ib & a + id \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

$$\mathbf{R}_{[SO(3)]} = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 - c^2 - d^2 & 2(bc - ad) & 2(bd + ac) \\ 2(bc + ad) & a^2 - b^2 + c^2 - d^2 & 2(cd - ab) \\ 2(bd - ac) & 2(cd + ab) & a^2 - b^2 - c^2 + d^2 \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Die Parameter a , b , c und d lauten

$$a = \cos(\theta/2) \quad b = \sin(\theta/2) n_x \quad c = \sin(\theta/2) n_y \quad d = \sin(\theta/2) n_z. \quad (4.4)$$

Wir betrachten jetzt das Verhalten dieser drei Darstellungen unter einer Drehung um 2π oder 360° und vergleichen zu diesem Zweck die Drehungen $\mathbf{R}_{[\]}(\underline{n}, \theta)$ und $\mathbf{R}_{[\]}(\underline{n}, \theta + 2\pi)$ miteinander. Wegen

$$\begin{aligned} \cos[(\theta + 2\pi)/2] &= \cos(\theta/2 + \pi) = -\cos(\theta/2) \\ \sin[(\theta + 2\pi)/2] &= \sin(\theta/2 + \pi) = -\sin(\theta/2) \end{aligned} \quad (4.5)$$

ändern die Parameter a , b , c und d gemeinsam ihr Vorzeichen, wodurch sich folgendes Verhalten ergibt:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{[\text{Quat.}]} &\Rightarrow -\mathbf{R}_{[\text{Quat.}]} \\ \mathbf{R}_{[SU(2)]} &\Rightarrow -\mathbf{R}_{[SU(2)]} \\ \mathbf{R}_{[SO(3)]} &\Rightarrow \mathbf{R}_{[SO(3)]}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Der Grund für dieses unterschiedliche Verhalten ist, daß die Koeffizienten von $\mathbf{R}_{[\text{Quat.}]}$ und $\mathbf{R}_{[SU(2)]}$ linear von den Parametern a , b , c und d abhängen, die von $\mathbf{R}_{[SO(3)]}$ jedoch quadratisch.

Es zeigt sich also, daß jedem Element $\mathbf{R}_{[SO(3)]}$ jeweils zwei Elemente $\pm\mathbf{R}_{[SU(2)]}$ zugeordnet sind, weshalb man sagt, daß die Gruppe $SU(2)$ die Gruppe $SO(3)$ doppelt überlagert („Double Cover“). Anders ausgedrückt, Rotationsquaternionen und die $SU(2)$ -Darstellung unterscheiden unabhängig von der Drehachse zwischen „keiner Drehung“ und einer Drehung um 2π oder 360° . Erst die Drehung um 4π oder 720° entspricht in allen drei Darstellungen wieder „keiner Drehung“.

Diese subtile Besonderheit tritt bei der Rotation von Tensoren über dem Ortsvektorraum wie z.B. dem Ortsvektor selbst nicht in Erscheinung. Objekte, die erst nach einer Drehung um 4π ihren Ausgangszustand wieder einnehmen, werden als Spinoren bezeichnet. Beispiele hierfür sind:

- Physikalische Systeme mit Spin $1/2$, deren Wellenfunktion nicht 2π - sondern 4π -periodisch ist
- Gegenstände, die durch verdrillbare flexible Verbindungen miteinander verknüpft sind

Wie man sieht, handelt es sich bei Spinoren nicht notwendigerweise um Quantensysteme. Allerdings sind makroskopische Gegenstände mit Spinorcharakter offenbar keine einfachen starren Körper, vielmehr scheinen topologische Eigenschaften wie der gegenseitige Verdrillungszustand der einzelnen Teilobjekte untereinander eine Rolle zu spielen.

Literaturverzeichnis

- [1] A.Messiah, *Quantenmechanik Bd. II*, de Gruyter, Berlin– New York (1985).
- [2] J.C.Baez, J.P.Muniain, *Gauge Fields, Knots and Gravity*, World Scientific, Singapore- New Jersey- London- Hong Kong, (1994).
- [3] J.Gray, *Olinde Rodrigues' Paper of 1840 on Transformation Groups*, Archive of the History of Exact Sciences **21**, 375, Springer, Berlin– Heidelberg (1979/80).
- [4] R.Hübner, *Lorentztransformationen*, private Aufzeichnungen, Wesel (2010).
- [5] J.Hicks, *A Poet with a Slide Rule: Piet Hein bestrides art and science*, Life Magazine, October 14, 55-66 (1966).
- [6] C.W.Misner, K.S.Thorne, J.A.Wheeler, *Gravitation, Ch. 41 (Spinors)*, W.H.Freeman and Company, New York (1973).
- [7] M.Weiss, *Lie Groups and Quantum Mechanics*, online gehostet von John Baez (2001).
- [8] P.A.M.Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford Science Publication, Oxford (1930).
- [9] G.Roepstorff, *Einführung in die Quantenfeldtheorie*, RWTH Aachen, Vorlesungsskript (2000).