

1 Young-Tableaus

Die möglichen (Standard-)Young-Tableaus zur Gruppe 4 lauten:

$$[4] : \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array}$$

$$[31] : \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ \hline 2 & & \end{array} , \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 & & \end{array} , \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & & \end{array}$$

$$[2^2] : \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} , \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array}$$

$$[1^22] : \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} , \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} , \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array}$$

$$[1^4] : \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline 4 \\ \hline \end{array}$$

2 Ausmultiplizierte Young-Tableaus

a, b, c, \dots = allgemeine Funktionen, die beispielsweise p-Orbitale repräsentieren könnten

[4] :

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{24}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_3 + a_1 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_1 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_2 + a_1 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_3 \\ + a_1 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_2 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_2 \\ \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_2 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \\ \cdot d_1 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

[31] :

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ \hline 2 & & \\ \hline \end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{12}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_2 \\ \cdot c_1 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_2 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 - a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 - a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 & & \\ \hline \end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{12}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_1 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_3 \\ \cdot c_1 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_2 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & & \\ \hline \end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{12}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_1 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_4 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_4 \\ \cdot c_3 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_1 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1)$$

[2²] :

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{16}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \\ \cdot d_3 - a_1 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_3 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_2 \\ \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 - a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{16}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_1 \cdot b_3 \cdot c_4 \\ \cdot d_2 + a_1 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_2 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 - a_2 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1 - a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 + a_3 \\ \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

[1²2] :

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{12}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_2 \\ \cdot c_1 \cdot d_4 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 - a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

1	3
2	
4	

$$\frac{1}{\sqrt{12}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_2$$

$$\cdot c_3 \cdot d_1 - a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_2 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

1	2
3	
4	

$$\frac{1}{\sqrt{12}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 - a_4 \cdot b_2$$

$$\cdot c_3 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_3 - a_2 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1)$$

$[1^4] :$

1
2
3
4

$$\frac{1}{\sqrt{24}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_1 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_1 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_2 + a_1 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_3 - a_1 \cdot b_4$$

$$\cdot c_3 \cdot d_2 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 - a_2 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_2 \cdot b_4 \cdot c_3$$

$$\cdot d_1 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_2 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_1$$

$$- a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

3 Spin

Die möglichen Kombinationen $|S M_S\rangle$ für die Tableaus der Permutationsgruppe 4 lauten:

[4] :

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array} \quad |2 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_3 \cdot \beta_4 + \alpha_1 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_2 \cdot \beta_4 + \alpha_1 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_2 \cdot \beta_3 + \alpha_2 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_1 \cdot \beta_4 \\ + \alpha_2 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_1 \cdot \beta_3 + \alpha_3 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_1 \cdot \beta_2)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array} \quad |2 \quad +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} (+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_4 + \alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_3 + \alpha_1 \cdot \alpha_3 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_2 + \alpha_2 \cdot \alpha_3 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array} \quad |2 \quad +2\rangle = (+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \alpha_3 \cdot \alpha_4)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array} \quad |2 \quad -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} (+\beta_1 \cdot \beta_2 \cdot \beta_3 \cdot \alpha_4 + \beta_1 \cdot \beta_2 \cdot \beta_4 \cdot \alpha_3 + \beta_1 \cdot \beta_3 \cdot \beta_4 \cdot \alpha_2 + \beta_2 \cdot \beta_3 \cdot \beta_4 \cdot \alpha_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array} \quad |2 \quad -2\rangle = (+\beta_1 \cdot \beta_2 \cdot \beta_3 \cdot \beta_4)$$

[31] :

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ 2 & & \\ \hline \end{array} \quad |1 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_4 - \alpha_2 \cdot \beta_1 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_4 + \alpha_1 \cdot \beta_2 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_3 - \alpha_2 \cdot \beta_1 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_3)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ 2 & & \\ \hline \end{array} \quad |1 \quad +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 \cdot \alpha_3 \cdot \alpha_4 - \alpha_2 \cdot \beta_1 \cdot \alpha_3 \cdot \alpha_4)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ 2 & & \\ \hline \end{array} \quad |1 \quad -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\beta_3 \cdot \beta_1 \cdot \beta_4 \cdot \alpha_2 + \beta_3 \cdot \beta_2 \cdot \beta_4 \cdot \alpha_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ 3 & & \\ \hline \end{array} \quad |1 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} (+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_3 \cdot \beta_4 - \alpha_3 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_1 \cdot \beta_4 + \alpha_1 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_3 \cdot \beta_2 - \alpha_3 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_1 \cdot \beta_2)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ 3 & & \\ \hline \end{array} \quad |1 \quad +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_3 \cdot \alpha_4 - \alpha_3 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_1 \cdot \alpha_4)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ 3 & & \\ \hline \end{array} \quad |1 \quad -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\beta_2 \cdot \beta_4 \cdot \beta_1 \cdot \alpha_3 + \beta_2 \cdot \beta_4 \cdot \beta_3 \cdot \alpha_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ 4 & & \\ \hline \end{array} \quad |1 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} (+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_3 \cdot \beta_4 - \alpha_4 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_3 \cdot \beta_1 + \alpha_1 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_2 \cdot \beta_4 - \alpha_4 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_2 \cdot \beta_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ 4 & & \\ \hline \end{array} \quad |1 \quad +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_4 - \alpha_4 \cdot \alpha_2 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_1)$$

1	2	3
4		

$$|1 \quad -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\beta_2 \cdot \beta_3 \cdot \alpha_1 \cdot \beta_4 - \beta_2 \cdot \beta_3 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_1)$$

$[2^2] :$

1	2
3	4

$$|0 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} (+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_3 \cdot \beta_4 - \alpha_1 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_3 \cdot \beta_2 - \alpha_3 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_1 \cdot \beta_4 + \alpha_3 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_1 \cdot \beta_2)$$

1	3
2	4

$$|0 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_4 - \alpha_1 \cdot \beta_2 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_3 - \alpha_2 \cdot \beta_1 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_4 + \alpha_2 \cdot \beta_1 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_3)$$

$[1^22] :$

(Da es nur zwei Spinfunktionen α, β gibt, sind mehr als zwei antisymmetrische Funktionen nicht möglich.)

$[1^4] :$

(Da es nur zwei Spinfunktionen α, β gibt, sind mehr als zwei antisymmetrische Funktionen nicht möglich.)

4 Überlappungsintegrale

4.1 Raumfunktionen

(nur nicht verschwindende Kombinationen gezeigt)

Identische Tableaus ergeben (aufgrund der normierten Funktionen darin) automatisch 1 und werden daher hier nicht aufgelistet.

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} = (-1/4)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} = (-1/6)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} = (-1/6)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} = (-1/6)$$

4.2 Spinfunktionen

(nur nicht verschwindende Kombinationen gezeigt)

Überlapp zw. versch. Tableaus ist 0 (wird hier ausgelassen), Überlapp zwischen gleichen Tableaus mit gleichem m_S -Wert ist 1 (wird hier ausgelassen)

hier informale Darstellung der Tableaus mit Spinfunktionen nach dem Schema:

$$\langle \text{Tableau 1} \mid \text{Tableau 2} \rangle = \left\langle \underbrace{S \quad m_S}_{\text{von Tableau 1}} \mid \underbrace{S \quad m_S}_{\text{von Tableau 2}} \right\rangle = \underbrace{\dots}_{\text{Überlapp der Tableaus 1 und 2}}$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ \hline 2 & & \\ \hline \end{array} \mid \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 & & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\sigma} = \langle 1 \quad -1 \mid 1 \quad -1 \rangle_{\Phi} = (+1/2)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ \hline 2 & & \\ \hline \end{array} \mid \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\sigma} = \langle 1 \quad -1 \mid 1 \quad -1 \rangle_{\Phi} = (+1/2)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 & & \\ \hline \end{array} \mid \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\sigma} = \langle 1 \quad -1 \mid 1 \quad -1 \rangle_{\Phi} = (+1/2)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \mid \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\sigma} = \langle 0 \quad +0 \mid 0 \quad +0 \rangle_{\Phi} = (+1/2)$$

5 Hamiltonmatrixelemente

Achtung: Der Hamiltonoperator ist unabhängig vom Spin, daher werden die Hamiltonintegrale der Spin-Tableaus zu den Überlappungsintegralen (s. Kapitel 4.2) und werden hier nicht erneut aufgeführt.

$$\begin{aligned} \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \mid \hat{H} \mid \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} &= +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \mid \hat{H} \mid a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle \\ &\quad - 1/2 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 \mid \hat{H} \mid d_2 \cdot b_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 \mid \hat{H} \mid c_1 \cdot a_3 \rangle + 1 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 \mid \hat{H} \mid d_3 \cdot c_4 \rangle + 1 \\ &\quad \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \mid \hat{H} \mid b_1 \cdot a_2 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_2 \cdot c_4 \mid \hat{H} \mid c_2 \cdot b_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_3 \mid \hat{H} \mid d_1 \cdot a_3 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \mid \hat{H} \mid \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} &= -1/4 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \mid \hat{H} \mid a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle - 1/4 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 \mid \hat{H} \mid d_3 \cdot c_4 \rangle \\ - 1/4 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \mid \hat{H} \mid b_1 \cdot a_2 \rangle &- 1/4 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 \mid \hat{H} \mid d_2 \cdot b_4 \rangle - 1/4 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 \mid \hat{H} \mid c_1 \cdot a_3 \rangle + 1/2 \cdot \langle b_4 \cdot c_3 \mid \hat{H} \mid c_4 \cdot b_3 \rangle + 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_2 \mid \hat{H} \mid d_1 \cdot a_2 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \mid \hat{H} \mid \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} &= +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \mid \hat{H} \mid a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle \\ &\quad - 1/2 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 \mid \hat{H} \mid d_3 \cdot c_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \mid \hat{H} \mid b_1 \cdot a_2 \rangle + 1 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 \mid \hat{H} \mid d_2 \cdot b_4 \rangle + 1 \\ &\quad \cdot \langle a_1 \cdot c_3 \mid \hat{H} \mid c_1 \cdot a_3 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_3 \cdot c_4 \mid \hat{H} \mid c_3 \cdot b_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_2 \mid \hat{H} \mid d_1 \cdot a_2 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \mid \hat{H} \mid \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} &= +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \mid \hat{H} \mid a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle - 1 \cdot \langle b_2 \cdot c_3 \mid \hat{H} \mid c_2 \cdot b_3 \rangle \\ &\quad - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \mid \hat{H} \mid b_1 \cdot a_2 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 \mid \hat{H} \mid c_1 \cdot a_3 \rangle + 1 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 \mid \hat{H} \mid d_1 \cdot a_4 \rangle \\ &\quad - 1/2 \cdot \langle c_2 \cdot d_3 \mid \hat{H} \mid d_2 \cdot c_3 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_1 \cdot d_3 \mid \hat{H} \mid d_1 \cdot b_3 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \middle| \hat{H} \middle| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} \\ &= -1/6 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \hat{H} | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle + 1/6 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 | \hat{H} | d_2 \cdot b_4 \rangle \\ &\quad - 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 | \hat{H} | d_1 \cdot a_4 \rangle - 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 | \hat{H} | c_1 \cdot a_3 \rangle + 1/6 \cdot \langle b_3 \cdot c_2 | \hat{H} | c_3 \cdot b_2 \rangle + 1/3 \cdot \langle c_2 \cdot d_4 | \hat{H} | d_2 \cdot c_4 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \middle| \hat{H} \middle| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} \\ &= -1/6 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \hat{H} | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle + 1/6 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 | \hat{H} | d_3 \cdot c_4 \rangle \\ & \quad - 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 | \hat{H} | d_1 \cdot a_4 \rangle - 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 | \hat{H} | b_1 \cdot a_2 \rangle + 1/6 \cdot \langle b_3 \cdot c_2 | \hat{H} | c_3 \cdot b_2 \rangle + 1/3 \cdot \langle b_1 \cdot d_4 | \hat{H} | d_1 \cdot b_4 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \middle| \hat{H} \middle| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} &= +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \hat{H} | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle - 1 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 | \hat{H} | d_2 \cdot b_4 \rangle \\ &\quad - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 | \hat{H} | b_1 \cdot a_2 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 | \hat{H} | d_1 \cdot a_4 \rangle + 1 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 | \hat{H} | c_1 \cdot a_3 \rangle \\ &\quad - 1/2 \cdot \langle c_2 \cdot d_4 | \hat{H} | d_2 \cdot c_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_1 \cdot c_2 | \hat{H} | c_1 \cdot b_2 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \middle| \hat{H} \middle| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} \\ &= -1/6 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \hat{H} | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle + 1/6 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 | \hat{H} | d_3 \cdot c_4 \rangle \\ &\quad - 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 | \hat{H} | c_1 \cdot a_3 \rangle - 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 | \hat{H} | b_1 \cdot a_2 \rangle + 1/6 \cdot \langle b_4 \cdot d_2 | \hat{H} | d_4 \cdot b_2 \rangle + 1/3 \cdot \langle b_1 \cdot c_3 | \hat{H} | c_1 \cdot b_3 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \middle| \hat{H} \middle| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} &= +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \hat{H} | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle - 1 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 | \hat{H} | d_3 \cdot c_4 \rangle \\ &\quad - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 | \hat{H} | c_1 \cdot a_3 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 | \hat{H} | d_1 \cdot a_4 \rangle + 1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 | \hat{H} | b_1 \cdot a_2 \rangle \\ &\quad - 1/2 \cdot \langle b_1 \cdot c_3 | \hat{H} | c_1 \cdot b_3 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_1 \cdot d_4 | \hat{H} | d_1 \cdot b_4 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left\langle \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline 4 \\ \hline \end{array} \right\rangle \hat{H} \left\langle \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline 4 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} \\
& = +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \hat{H} | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 | \hat{H} | d_3 \cdot c_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_2 \cdot c_3 | \hat{H} | c_2 \cdot b_3 \rangle \\
& \quad - 1/2 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 | \hat{H} | d_2 \cdot b_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 | \hat{H} | b_1 \cdot a_2 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 | \hat{H} | c_1 \cdot a_3 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 | \hat{H} | d_1 \cdot a_4 \rangle
\end{aligned}$$

Inhaltsverzeichnis

1 Young-Tableaus 1

2 Ausmultiplizierte Young-Tableaus 2

3 Spin 4

4 Überlappungsintegrale 6

 4.1 Raumfunktionen 6

 4.2 Spinfunktionen 7

5 Hamiltonmatrixelemente 7