

1 Young-Tableaus

Die möglichen (Standard-)Young-Tableaus zur Gruppe 3 lauten:

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

$$[21] : \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array} , \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array}$$

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

2 Ausmultiplizierte Young-Tableaus

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

$[3]$:

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{6}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 + a_1 \cdot b_3 \cdot c_2 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_1)$$

$[21]$:

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

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

$[1^3]$:

$$\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline \end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{6}} (+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 - a_1 \cdot b_3 \cdot c_2 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_1)$$

3 Spin

Die möglichen Kombinationen $|S M_S\rangle$ für die Tableaus der Permutationsgruppe 3 lauten:

$[3] :$

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

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

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

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

$[21] :$

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

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

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

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

$[1^3] :$

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

4 Überlappingsintegrale

4.1 Raumfunktionen

(nur nicht verschwindende Kombinationen gezeigt)

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

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

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:

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

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

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.

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

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

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

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

Inhaltsverzeichnis

1 Young-Tableaus 1

2 Ausmultiplizierte Young-Tableaus 2

3 Spin 3

4 Überlappungsintegrale 4

 4.1 Raumfunktionen 4

 4.2 Spinfunktionen 5

5 Hamiltonmatrixelemente 5