Erstellung von Überlappungs- und Hamiltonintegralen auf Basis der Symmetrieeigenschaften von Young-Tableaus

hier für die Permutationsgruppe: 3

28. Juni 2024

1 Young-Tableaus

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

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

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

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

2 Ausmultiplizierte Young-Tableaus

2.1 Raum-Funktionen

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

$[3]:$

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

$[21]:$

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

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

$\left[1^3\right]:$

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

2.2 Spin-Funktionen

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

$[3]$:

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

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

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

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

$[21]$:

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

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

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

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

$\left[1^3\right]$:

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

3 Überlappungsintegrale

3.1 Raumfunktionen

(nur nicht verschwindende Kombinationen gezeigt)

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

$$\left\langle \, \ytableaushort{13,2} \, \middle\| \, \ytableaushort{12,3} \, \right\rangle_{\Phi} = (-1/4)$$

3.2 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:

$$\langle \,\text{Tableau 1}\,|\,\text{Tableau 2}\,\rangle = \left\langle \underbrace{S \quad m_S}_{\text{von Tableau 1}} \;\middle|\; \underbrace{S \quad m_S}_{\text{von Tableau 2}} \right\rangle = \underbrace{\ldots}_{\text{Überlapp der Tableaus 1 und 2}}$$

$$\left\langle \, \ytableaushort{13,2} \, \middle\| \, \ytableaushort{12,3} \, \right\rangle_{\sigma} = \langle\, 1/2 \quad +1/2 \,|\, 1/2 \quad +1/2 \,\rangle_{\Phi} = (+1/2)$$

4 Hamiltonmatrixelemente

4.1 Raum-Funktionen

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

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

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

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

4.2 Spin-Funktionen

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

Inhaltsverzeichnis