

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

hier für die Permutationsgruppe: 1

28. Juni 2024

1 Young-Tableaus

Die möglichen (Standard-)Young-Tableaus zur Gruppe 1 lauten:

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

2 Ausmultiplizierte Young-Tableaus

2.1 Raum-Funktionen

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

[1] :

$$\boxed{1} \quad (+a_1)$$

2.2 Spin-Funktionen

Die möglichen Kombinationen $|S M_S\rangle$ für die Tableaus der Permutationsgruppe 1 lauten:

[1] :

$$\boxed{1} \quad |1/2 \quad -1/2\rangle = (+\beta_1)$$

$$\boxed{1} \quad |1/2 \quad +1/2\rangle = (+\alpha_1)$$

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.

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:

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

4 Hamiltonmatrixelemente

4.1 Raum-Funktionen

$$\left\langle \boxed{1} \left| \hat{H} \right| \boxed{1} \right\rangle_{\Phi} = + \langle a_1 | \hat{H} | a_1 \rangle$$

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

1	Young-Tableaus	1
2	Ausmultiplizierte Young-Tableaus	2
2.1	Raum-Funktionen	2
2.2	Spin-Funktionen	2
3	Überlappungsintegrale	3
3.1	Raumfunktionen	3
3.2	Spinfunktionen	3
4	Hamiltonmatrixelemente	4
4.1	Raum-Funktionen	4
4.2	Spin-Funktionen	4