# 1 Young-Tableaus

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

$$[3]:$$
  $\boxed{1 \mid 2 \mid 3}$ 

$$[12]: \quad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3\\\hline 2 & & \\\hline \end{array} \ , \quad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2\\\hline 3 & \\\hline \end{array}$$

$$\begin{bmatrix} 1^3 \end{bmatrix} : \quad \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

#### 2 Ausmultiplizierte Young-Tableaus

 $a,b,c,\dots$  = allgemeine Funktionen, die beispielsweise p<br/>-Orbitale repräsentieren könnten

[3]:

$$\boxed{1 \ | \ 2 \ | \ 3} \quad \frac{1}{\sqrt{6}} \left( +a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 + a_1 \cdot b_3 \cdot c_2 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \right)$$

[12]:

 $[1^3]:$ 

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

### 3 Spin

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

[3]:

$$\boxed{1 \mid 2 \mid 3} \qquad |1.5 \qquad -0.5\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( +\beta_1 \cdot \beta_2 \cdot \alpha_3 + \beta_1 \cdot \beta_3 \cdot \alpha_2 + \beta_2 \cdot \beta_3 \cdot \alpha_1 \right)$$

$$\boxed{1 \mid 2 \mid 3} \qquad |1.5 \qquad +0.5\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( +\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_3 + \alpha_1 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_2 + \alpha_2 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_1 \right)$$

$$\boxed{1 \ 2 \ 3} \qquad |1.5 \ +1.5\rangle = (+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \alpha_3)$$

$$\boxed{1 \ 2 \ 3} \qquad |1.5 \ -1.5\rangle = (+\beta_1 \cdot \beta_2 \cdot \beta_3)$$

[12]:

 $[1^3]:$ 

#### 4 Überlappungsintegrale

Raumfunktionen: Überlapp zw. versch. Tableaus ist 0, Überlapp zwischen gleichen Tableaus mit gleichem  $m_S$ -Wert ist 1

$$\begin{split} & \langle \boxed{1 \ 2 \ 3} \ \boxed{1 \ 2 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle \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}) \right| \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}) \right\rangle = \\ & \langle \boxed{1 \ 2 \ 3} \ \boxed{1 \ 2 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle \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}) \right| \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}) \right\rangle = \\ & \langle \boxed{1 \ 2 \ 3} \ \boxed{1 \ 2 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle \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}) \right| (+\alpha_{1} \cdot \alpha_{2} \cdot \alpha_{3}) \right\rangle = (0) \\ & \langle \boxed{1 \ 2 \ 3} \ \boxed{1 \ 2 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle \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}) \right| (+\beta_{1} \cdot \beta_{2} \cdot \beta_{3}) \right\rangle = (0) \\ & \langle \boxed{1 \ 2 \ 3} \ \boxed{1 \ 2 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle \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}) \right| \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}) \right\rangle = (0) \\ & \langle \boxed{1 \ 2 \ 3} \ \boxed{1 \ 2 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle \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}) \right| (+\beta_{1} \cdot \beta_{2} \cdot \beta_{3}) \right\rangle = (0) \\ & \langle \boxed{1 \ 2 \ 3} \ \boxed{1 \ 2 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle (+\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| (+\beta_{1} \cdot \beta_{2} \cdot \beta_{3}) \right\rangle = (0) \\ & \langle \boxed{1 \ 2 \ 3} \ \boxed{1 \ 2 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle (+\beta_{1} \cdot \alpha_{2} \cdot \alpha_{3}) \right| (+\beta_{1} \cdot \beta_{2} \cdot \beta_{3}) \right\rangle = (1) \\ & \langle \boxed{1 \ 2 \ 3} \ \boxed{1 \ 2 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle (+\beta_{1} \cdot \alpha_{2} \cdot \alpha_{3}) \right| (+\beta_{1} \cdot \beta_{2} \cdot \beta_{3}) \right\rangle = (1) \\ & \langle \boxed{1 \ 2 \ 3} \ \boxed{1 \ 2 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle (+\beta_{1} \cdot \beta_{2} \cdot \beta_{3}) \right\rangle = \langle (+\beta_{1} \cdot \beta_{2} \cdot \beta_{3}) \rangle = (1) \\ & \langle \boxed{1 \ 2 \ 3} \ \boxed{1 \ 2 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle (+\beta_{1} \cdot \beta_{2} \cdot \beta_{3} \cdot \beta_{2} \cdot \alpha_{1}) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\beta_{3} \cdot \beta_{1} \cdot \alpha_{2} + \beta_{3} \cdot \beta_{2} \cdot \alpha_{1}) \right\rangle = (+1) \\ & \langle \boxed{1 \ 3} \ \boxed{1 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\beta_{3} \cdot \beta_{1} \cdot \alpha_{2} + \beta_{3} \cdot \beta_{2} \cdot \alpha_{1}\right) \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(+\alpha_{1} \cdot \beta_{2} \cdot \alpha_{3} - \alpha_{2} \cdot \beta_{1} \cdot \alpha_{3}\right) \right\rangle = (+1) \\ & \langle \boxed{1 \ 3} \ \boxed{1 \ 3} \rangle_{\sigma} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \left(+\alpha_{1} \cdot \beta_{2} \cdot$$

## Inhaltsverzeichnis

1	Young-Tableaus	1
2	Ausmultiplizierte Young-Tableaus	2
3	Spin	3
1	Überlannungsintegrale	4