

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

hier für die Permutationsgruppe: 0

30. Mai 2024

1 Young-Tableaus

Die möglichen (Standard-)Young-Tableaus zur Gruppe 2 lauten:

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

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

2 Ausmultiplizierte Young-Tableaus

2.1 Raum-Funktionen

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

$[2]$:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (+a_1 \cdot b_2 + a_2 \cdot b_1)$$

$[1^2]$:

$$\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (+a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1)$$

2.2 Spin-Funktionen

Die möglichen Kombinationen $|S M_S\rangle$ für die Tableaus der Permutationsgruppe 2 lauten:

$[2]$:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \quad |1 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 + \alpha_2 \cdot \beta_1)$$

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

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

$[1^2]$:

$$\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} \quad |0 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 - \alpha_2 \cdot \beta_1)$$

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

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \right| \hat{H} \left| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} = +2 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 | \hat{H} | a_1 \cdot b_2 \rangle$$

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