

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

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

$[2]$:

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

$[1^2]$:

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

3 Spin

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

$[2]$:

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

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

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

$[1^2]$:

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

4 Überlappungsintegrale

4.1 Raumfunktionen

(nur nicht verschwindende Kombinationen gezeigt)

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

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:

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

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.

$$\langle \boxed{1} \boxed{2} \mid \hat{H} \mid \boxed{1} \boxed{2} \rangle_{\Phi} = +2 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \mid \hat{H} \mid a_1 \cdot b_2 \rangle$$

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