

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

$[2]$:

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

$[1^2]$:

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

3 Spin

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

$[2] :$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \quad |1.0 \quad + 0.0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 + \alpha_2 \cdot \beta_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \quad |1.0 \quad + 1.0\rangle = (+\alpha_1 \cdot \alpha_2)$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \quad |1.0 \quad - 1.0\rangle = (+\beta_1 \cdot \beta_2)$$

$[1^2] :$

$$\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} \quad |0.0 \quad + 0.0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 - \alpha_2 \cdot \beta_1)$$

4 Überlappungsintegrale

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

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \left\| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} = (+1)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \left\| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\sigma} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 + \alpha_2 \cdot \beta_1) \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 + \alpha_2 \cdot \beta_1) \right. \right\rangle = (+1)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \left\| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\sigma} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 + \alpha_2 \cdot \beta_1) \left| (+\alpha_1 \cdot \alpha_2) \right. \right\rangle = (0)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \left\| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\sigma} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 + \alpha_2 \cdot \beta_1) \left| (+\beta_1 \cdot \beta_2) \right. \right\rangle = (0)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \left\| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\sigma} = \langle (+\alpha_1 \cdot \alpha_2) | (+\alpha_1 \cdot \alpha_2) \rangle = (+1)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \left\| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\sigma} = \langle (+\alpha_1 \cdot \alpha_2) | (+\beta_1 \cdot \beta_2) \rangle = (0)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \left\| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\sigma} = \langle (+\beta_1 \cdot \beta_2) | (+\beta_1 \cdot \beta_2) \rangle = (+1)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} \left\| \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\Phi} = (+1)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} \left\| \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} \right\rangle_{\sigma} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 - \alpha_2 \cdot \beta_1) \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (+\alpha_1 \cdot \beta_2 - \alpha_2 \cdot \beta_1) \right. \right\rangle = (+1)$$

Inhaltsverzeichnis

1 Young-Tableaus 1

2 Ausmultiplizierte Young-Tableaus 2

3 Spin 3

4 Überlappungsintegrale 4