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

hier für die Permutationsgruppe: 4

30. Mai 2024

1 Young-Tableaus

Die möglichen (Standard-)Young-Tableaus zur Gruppe 4 lauten:

$$[4]: \quad \begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline\end{array}$$

$$[13]: \quad \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 3 & 4 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array} \quad , \quad \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array} \quad , \quad \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 \\ \cline{1-1}\end{array}$$

$$[2^2]: \quad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array} \quad , \quad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array}$$

$$[1^2 2]: \quad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 4 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1} 3 \\ \cline{1-1}\end{array} \quad , \quad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1} 4 \\ \cline{1-1}\end{array} \quad , \quad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1} 4 \\ \cline{1-1}\end{array}$$

$$[1^4]: \quad \begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline 4 \\ \hline\end{array}$$

2 Ausmultiplizierte Young-Tableaus

2.1 Raum-Funktionen

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

[4] :

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4\\\hline\end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{24}}(+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_3 + a_1 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_1 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_2 + a_1 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_3 + a_1 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_2 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_2 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_2 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

[13] :

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{12}}(+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_2 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 - a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 - a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{12}}(+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_1 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_2 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{12}}(+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_1 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_4 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_1 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1)$$

$[2^2]$:

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{16}}(+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_1 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_3 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 - a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2&4\\\hline\end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{16}}(+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_1 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_2 + a_1 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_2 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 - a_2 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1 - a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

$[1^2 2]$:

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1} 3 & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{12}}\,(+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 - a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1} 4 & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{12}}\,(+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1 - a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_2 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 + a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1} 4 & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{12}}\,(+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 + a_2 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_3 - a_2 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1)$$

$[1^4]$:

$$\begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline 4 \\ \hline\end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{24}}\,(+a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_1 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_3 - a_1 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_4 + a_1 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_2 + a_1 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_3 - a_1 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_2 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_3 + a_2 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_4 - a_2 \cdot b_3 \cdot c_4 \cdot d_1 - a_2 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_3 + a_2 \cdot b_4 \cdot c_3 \cdot d_1 + a_3 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_4 - a_3 \cdot b_1 \cdot c_4 \cdot d_2 - a_3 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_4 + a_3 \cdot b_2 \cdot c_4 \cdot d_1 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_3 \cdot b_4 \cdot c_2 \cdot d_1 - a_4 \cdot b_1 \cdot c_2 \cdot d_3 + a_4 \cdot b_1 \cdot c_3 \cdot d_2 + a_4 \cdot b_2 \cdot c_1 \cdot d_3 - a_4 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_1 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_1 \cdot d_2 - a_4 \cdot b_3 \cdot c_2 \cdot d_1)$$

2.2 Spin-Funktionen

Die möglichen Kombinationen $|S\ M_S\rangle$ für die Tableaus der Permutationsgruppe 4 lauten:

[4] :

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4\\\hline\end{array} \qquad |2 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\,(+\alpha_1\cdot\alpha_2\cdot\beta_3\cdot\beta_4+\alpha_1\cdot\alpha_3\cdot\beta_2\cdot\beta_4+\alpha_1\cdot\alpha_4\cdot\beta_2\cdot\beta_3+\alpha_2\cdot\alpha_3\cdot\beta_1\cdot\beta_4 +\alpha_2\cdot\alpha_4\cdot\beta_1\cdot\beta_3+\alpha_3\cdot\alpha_4\cdot\beta_1\cdot\beta_2)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4\\\hline\end{array} \qquad |2 \quad +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}\,(+\alpha_1\cdot\alpha_2\cdot\alpha_3\cdot\beta_4+\alpha_1\cdot\alpha_2\cdot\alpha_4\cdot\beta_3+\alpha_1\cdot\alpha_3\cdot\alpha_4\cdot\beta_2+\alpha_2\cdot\alpha_3\cdot\alpha_4\cdot\beta_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4\\\hline\end{array} \qquad |2 \quad +2\rangle = (+\alpha_1\cdot\alpha_2\cdot\alpha_3\cdot\alpha_4)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4\\\hline\end{array} \qquad |2 \quad -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}\,(+\beta_1\cdot\beta_2\cdot\beta_3\cdot\alpha_4+\beta_1\cdot\beta_2\cdot\beta_4\cdot\alpha_3+\beta_1\cdot\beta_3\cdot\beta_4\cdot\alpha_2+\beta_2\cdot\beta_3\cdot\beta_4\cdot\alpha_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4\\\hline\end{array} \qquad |2 \quad -2\rangle = (+\beta_1\cdot\beta_2\cdot\beta_3\cdot\beta_4)$$

[13] :

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} \qquad |1 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}\,(+\alpha_1\cdot\beta_2\cdot\alpha_3\cdot\beta_4-\alpha_2\cdot\beta_1\cdot\alpha_3\cdot\beta_4+\alpha_1\cdot\beta_2\cdot\alpha_4\cdot\beta_3-\alpha_2\cdot\beta_1\cdot\alpha_4\cdot\beta_3)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} \qquad |1 \quad +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(+\alpha_1\cdot\beta_2\cdot\alpha_3\cdot\alpha_4-\alpha_2\cdot\beta_1\cdot\alpha_3\cdot\alpha_4)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} \qquad |1 \quad -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(-\beta_3\cdot\beta_1\cdot\beta_4\cdot\alpha_2+\beta_3\cdot\beta_2\cdot\beta_4\cdot\alpha_1)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} \qquad |1 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}\,(+\alpha_1\cdot\alpha_2\cdot\beta_3\cdot\beta_4-\alpha_3\cdot\alpha_2\cdot\beta_1\cdot\beta_4+\alpha_1\cdot\alpha_4\cdot\beta_3\cdot\beta_2-\alpha_3\cdot\alpha_4\cdot\beta_1\cdot\beta_2)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} \qquad |1 \quad +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(+\alpha_1\cdot\alpha_2\cdot\beta_3\cdot\alpha_4-\alpha_3\cdot\alpha_2\cdot\beta_1\cdot\alpha_4)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array} \qquad |1 \quad -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\beta_2 \cdot \beta_4 \cdot \beta_1 \cdot \alpha_3 + \beta_2 \cdot \beta_4 \cdot \beta_3 \cdot \alpha_1\right)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 \\ \cline{1-1}\end{array} \qquad |1 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}\left(+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_3 \cdot \beta_4 - \alpha_4 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_3 \cdot \beta_1 + \alpha_1 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_2 \cdot \beta_4 - \alpha_4 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_2 \cdot \beta_1\right)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 \\ \cline{1-1}\end{array} \qquad |1 \quad +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_4 - \alpha_4 \cdot \alpha_2 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_1\right)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 \\ \cline{1-1}\end{array} \qquad |1 \quad -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(+\beta_2 \cdot \beta_3 \cdot \alpha_1 \cdot \beta_4 - \beta_2 \cdot \beta_3 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_1\right)$$

$\left[2^2\right]$:

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array} \qquad |0 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}\left(+\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_3 \cdot \beta_4 - \alpha_1 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_3 \cdot \beta_2 - \alpha_3 \cdot \alpha_2 \cdot \beta_1 \cdot \beta_4 + \alpha_3 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_1 \cdot \beta_2\right)$$

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array} \qquad |0 \quad +0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}\left(+\alpha_1 \cdot \beta_2 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_4 - \alpha_1 \cdot \beta_2 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_3 - \alpha_2 \cdot \beta_1 \cdot \alpha_3 \cdot \beta_4 + \alpha_2 \cdot \beta_1 \cdot \alpha_4 \cdot \beta_3\right)$$

$\left[1^2 2\right]$:

(Da es nur zwei Spinfunktionen α, β gibt, sind mehr als zwei antisymmetrische Funktionen nicht möglich.)

$\left[1^4\right]$:

(Da es nur zwei Spinfunktionen α, β gibt, sind mehr als zwei antisymmetrische Funktionen nicht möglich.)

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.

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array} \middle\| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2&4\\\hline\end{array}\right\rangle_\Phi = (-1/4)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline \multicolumn{1}{|c|}{2}\\\cline{1-1} \multicolumn{1}{|c|}{3}\\\cline{1-1}\end{array} \middle\| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline \multicolumn{1}{|c|}{2}\\\cline{1-1} \multicolumn{1}{|c|}{4}\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_\Phi = (-1/6)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline \multicolumn{1}{|c|}{2}\\\cline{1-1} \multicolumn{1}{|c|}{3}\\\cline{1-1}\end{array} \middle\| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline \multicolumn{1}{|c|}{3}\\\cline{1-1} \multicolumn{1}{|c|}{4}\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_\Phi = (-1/6)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline \multicolumn{1}{|c|}{2}\\\cline{1-1} \multicolumn{1}{|c|}{4}\\\cline{1-1}\end{array} \middle\| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline \multicolumn{1}{|c|}{3}\\\cline{1-1} \multicolumn{1}{|c|}{4}\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_\Phi = (-1/6)$$

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:

$$\langle\,\text{Tableau 1}\,|\,\text{Tableau 2}\,\rangle = \left\langle \underbrace{S \quad m_S}_{\text{von Tableau 1}} \middle| \underbrace{S \quad m_S}_{\text{von Tableau 2}} \right\rangle = \underbrace{\ldots}_{\text{Überlapp der Tableaus 1 und 2}}$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline \multicolumn{1}{|c|}{2}\\\cline{1-1}\end{array} \middle\| \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline \multicolumn{1}{|c|}{3}\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_\sigma = \langle 1 \quad -1\,|\,1 \quad -1\,\rangle_\Phi = (+1/2)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 3 & 4 \\ \hline \multicolumn{1}{|c|}{2} & \multicolumn{2}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} \middle\| \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \multicolumn{1}{|c|}{4} & \multicolumn{2}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} \right\rangle_\sigma = \langle 1 \quad -1 \,|\, 1 \quad -1 \rangle_\Phi = (+1/2)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 4 \\ \hline \multicolumn{1}{|c|}{3} & \multicolumn{2}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} \middle\| \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \multicolumn{1}{|c|}{4} & \multicolumn{2}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} \right\rangle_\sigma = \langle 1 \quad -1 \,|\, 1 \quad -1 \rangle_\Phi = (+1/2)$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array} \middle\| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array} \right\rangle_\sigma = \langle 0 \quad +0 \,|\, 0 \quad +0 \rangle_\Phi = (+1/2)$$

4 Hamiltonmatrixelemente

4.1 Raum-Funktionen

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array} \right| \hat{H} \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array} \right\rangle_{\Phi} = +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle$$

$$- 1/2 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_2 \cdot b_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 | \, \hat{H} \, | c_1 \cdot a_3 \rangle + 1 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_3 \cdot c_4 \rangle + 1$$
$$\cdot \langle a_1 \cdot b_2 | \, \hat{H} \, | b_1 \cdot a_2 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_2 \cdot c_4 | \, \hat{H} \, | c_2 \cdot b_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_3 | \, \hat{H} \, | d_1 \cdot a_3 \rangle$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array} \right| \hat{H} \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2&4\\\hline\end{array} \right\rangle_{\Phi} = -1/4 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle - 1/4 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_3 \cdot c_4 \rangle$$
$$-1/4 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 | \, \hat{H} \, | b_1 \cdot a_2 \rangle - 1/4 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_2 \cdot b_4 \rangle - 1/4 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 | \, \hat{H} \, | c_1 \cdot a_3 \rangle + 1/2 \cdot \langle b_4 \cdot c_3 | \, \hat{H} \, | c_4 \cdot b_3 \rangle + 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_2 | \, \hat{H} \, | d_1 \cdot a_2 \rangle$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2&4\\\hline\end{array} \right| \hat{H} \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2&4\\\hline\end{array} \right\rangle_{\Phi} = +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle$$

$$- 1/2 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_3 \cdot c_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 | \, \hat{H} \, | b_1 \cdot a_2 \rangle + 1 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_2 \cdot b_4 \rangle + 1$$
$$\cdot \langle a_1 \cdot c_3 | \, \hat{H} \, | c_1 \cdot a_3 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_3 \cdot c_4 | \, \hat{H} \, | c_3 \cdot b_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_2 | \, \hat{H} \, | d_1 \cdot a_2 \rangle$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 2\\\cline{1-1} 3\\\cline{1-1}\end{array} \right| \hat{H} \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 2\\\cline{1-1} 3\\\cline{1-1}\end{array} \right\rangle_{\Phi} = +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle - 1 \cdot \langle b_2 \cdot c_3 | \, \hat{H} \, | c_2 \cdot b_3 \rangle$$

$$- 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 | \, \hat{H} \, | b_1 \cdot a_2 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 | \, \hat{H} \, | c_1 \cdot a_3 \rangle + 1 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_1 \cdot a_4 \rangle$$
$$- 1/2 \cdot \langle c_2 \cdot d_3 | \, \hat{H} \, | d_2 \cdot c_3 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_1 \cdot d_3 | \, \hat{H} \, | d_1 \cdot b_3 \rangle$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 2\\\cline{1-1} 3\\\cline{1-1}\end{array} \right| \hat{H} \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1} 4\\\cline{1-1}\end{array} \right\rangle_{\Phi}$$
$$= -1/6 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle + 1/6 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_2 \cdot b_4 \rangle$$
$$- 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_1 \cdot a_4 \rangle - 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 | \, \hat{H} \, | c_1 \cdot a_3 \rangle + 1/6 \cdot \langle b_3 \cdot c_2 | \, \hat{H} \, | c_3 \cdot b_2 \rangle + 1/3 \cdot \langle c_2 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_2 \cdot c_4 \rangle$$

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 2\\\cline{1-1} 3\\\cline{1-1}\end{array} \right| \hat{H} \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1} 4\\\cline{1-1}\end{array} \right\rangle_{\Phi}$$
$$= -1/6 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle + 1/6 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_3 \cdot c_4 \rangle$$
$$- 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_1 \cdot a_4 \rangle - 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 | \, \hat{H} \, | b_1 \cdot a_2 \rangle + 1/6 \cdot \langle b_3 \cdot c_2 | \, \hat{H} \, | c_3 \cdot b_2 \rangle + 1/3 \cdot \langle b_1 \cdot d_4 | \, \hat{H} \, | d_1 \cdot b_4 \rangle$$

$$\left\langle \begin{ytableau} 1 & 3 \\ 2 \\ 4 \end{ytableau} \right| \hat{H} \left| \begin{ytableau} 1 & 3 \\ 2 \\ 4 \end{ytableau} \right\rangle_{\Phi} = +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle - 1 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| d_2 \cdot b_4 \rangle$$
$$- 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 |\, \hat{H} \,| b_1 \cdot a_2 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| d_1 \cdot a_4 \rangle + 1 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 |\, \hat{H} \,| c_1 \cdot a_3 \rangle$$
$$- 1/2 \cdot \langle c_2 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| d_2 \cdot c_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_1 \cdot c_2 |\, \hat{H} \,| c_1 \cdot b_2 \rangle$$

$$\left\langle \begin{ytableau} 1 & 3 \\ 2 \\ 4 \end{ytableau} \right| \hat{H} \left| \begin{ytableau} 1 & 2 \\ 3 \\ 4 \end{ytableau} \right\rangle_{\Phi}$$
$$= -1/6 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle + 1/6 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| d_3 \cdot c_4 \rangle$$
$$- 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 |\, \hat{H} \,| c_1 \cdot a_3 \rangle - 1/6 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 |\, \hat{H} \,| b_1 \cdot a_2 \rangle + 1/6 \cdot \langle b_4 \cdot d_2 |\, \hat{H} \,| d_4 \cdot b_2 \rangle + 1/3 \cdot \langle b_1 \cdot c_3 |\, \hat{H} \,| c_1 \cdot b_3 \rangle$$

$$\left\langle \begin{ytableau} 1 & 2 \\ 3 \\ 4 \end{ytableau} \right| \hat{H} \left| \begin{ytableau} 1 & 2 \\ 3 \\ 4 \end{ytableau} \right\rangle_{\Phi} = +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle - 1 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| d_3 \cdot c_4 \rangle$$
$$- 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 |\, \hat{H} \,| c_1 \cdot a_3 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| d_1 \cdot a_4 \rangle + 1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 |\, \hat{H} \,| b_1 \cdot a_2 \rangle$$
$$- 1/2 \cdot \langle b_1 \cdot c_3 |\, \hat{H} \,| c_1 \cdot b_3 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_1 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| d_1 \cdot b_4 \rangle$$

$$\left\langle \begin{ytableau} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{ytableau} \right| \hat{H} \left| \begin{ytableau} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{ytableau} \right\rangle_{\Phi}$$
$$= +1 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| a_1 \cdot b_2 \cdot c_3 \cdot d_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle c_3 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| d_3 \cdot c_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle b_2 \cdot c_3 |\, \hat{H} \,| c_2 \cdot b_3 \rangle$$
$$- 1/2 \cdot \langle b_2 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| d_2 \cdot b_4 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot b_2 |\, \hat{H} \,| b_1 \cdot a_2 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot c_3 |\, \hat{H} \,| c_1 \cdot a_3 \rangle - 1/2 \cdot \langle a_1 \cdot d_4 |\, \hat{H} \,| d_1 \cdot a_4 \rangle$$

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