Kurze Betrachtungen aus der Festkörperphysik

Wellenfunktionen der sp³-Hybridisierung

Tobias Krähling 23.09.2012

Zusammenfassung

Im Folgenden soll gezeigt werden, dass die Wellenfunktionen der sp^3-Hybridisierung normiert und orthogonal zueinander sind.

Die Wellenfunktionen für die sp^3-Hybridisierung sind gegeben über

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= \frac{1}{2}\left(s + p_x + p_y + p_z\right)\\
\psi_2 &= \frac{1}{2}\left(s + p_x - p_y - p_z\right)\\
\psi_3 &= \frac{1}{2}\left(s - p_x + p_y - p_z\right)\\
\psi_4 &= \frac{1}{2}\left(s - p_x - p_y + p_z\right)
\end{aligned}$$

Dabei sind die Wellenfunktionen s, p_x, p_y und p_z normiert und orthogonal zueinander. Gezeigt werden soll, dass auch die Wellenfunktionen ψ_1, ψ_2, ψ_3 und ψ_4 normiert und orthogonal zueinander sind.

Zwei Funktionen sind orthogonal zueinander, wenn die Bedingung

$$\int \psi_n^* \psi_m \,\mathrm{d}\tau = 0 \quad \text{für } n \neq m \tag{1}$$

erfüllt ist. Ist die Bedingung

$$\int |\psi_n|^2 \,\mathrm{d}\tau = \int \psi_n^* \psi_n \,\mathrm{d}\tau = 1 \tag{2}$$

erfüllt, so ist ψ_n normiert. Fasst man beides zusammen, so ist ein Satz von Wellenfunktionen normiert und orthogonal zueinander, wenn gilt:

$$\forall n,m : \int \psi_n^* \psi_m \,\mathrm{d}\tau = \delta_{nm} \tag{3}$$

Da die Wellenfunktionen s, p_x, p_y und p_z bereits normiert und orthogonal zueinander sind, gilt, dass

- Integrale über gemischte Terme der Form $s^* p_x$, $p_x^* p_y$, ... wegen der Orthogonalität wegfallen $(= 0)$
- Integrale über Terme der Form $s^* s$, $p_x^* p_x$, ... werden wegen Normierung 1 ergeben

Zunächst sei der Orthogonalität über Gleichung (1) für die Wellenfunktionen geprüft:

$$\begin{aligned}
\int \psi_1^* \psi_2 \,\mathrm{d}\tau &= \int \psi_2^* \psi_1 \,\mathrm{d}\tau\\
&= \int \frac{1}{4}\left(s^* s + p_x^* p_x - p_y^* p_y - p_z^* p_z\right) \mathrm{d}\tau\\
&= 0\\
\int \psi_1^* \psi_3 \,\mathrm{d}\tau &= \int \psi_3^* \psi_1 \,\mathrm{d}\tau\\
&= \int \frac{1}{4}\left(s^* s - p_x^* p_x + p_y^* p_y - p_z^* p_z\right) \mathrm{d}\tau\\
&= 0\\
\int \psi_1^* \psi_4 \,\mathrm{d}\tau &= \int \psi_4^* \psi_1 \,\mathrm{d}\tau\\
&= \int \frac{1}{4}\left(s^* s - p_x^* p_x - p_y^* p_y + p_z^* p_z\right) \mathrm{d}\tau\\
&= 0
\end{aligned}$$

Analog erhält man $\int \psi_2^* \psi_3 \,\mathrm{d}\tau = \int \psi_2^* \psi_4 \,\mathrm{d}\tau = \int \psi_3^* \psi_4 \,\mathrm{d}\tau = 0$. Das heißt, die Wellenfunktionen sind orthogonal zueinander.

Die Prüfung der Normierung der Wellenfunktionen erfolgt über Gleichung (2):

$$\int \psi_1^* \psi_1 \, \mathrm{d}\boldsymbol{\tau} = \int \frac{1}{4} \left(s^* s + p_x^* p_x + p_y^* p_y + p_z^* p_z \right) \mathrm{d}\boldsymbol{\tau} = 1$$
$$\int \psi_2^* \psi_2 \, \mathrm{d}\boldsymbol{\tau} = \int \frac{1}{4} \left(s^* s + p_x^* p_x + p_y^* p_y + p_z^* p_z \right) \mathrm{d}\boldsymbol{\tau} = 1$$
$$\int \psi_3^* \psi_3 \, \mathrm{d}\boldsymbol{\tau} = \int \frac{1}{4} \left(s^* s + p_x^* p_x + p_y^* p_y + p_z^* p_z \right) \mathrm{d}\boldsymbol{\tau} = 1$$
$$\int \psi_4^* \psi_4 \, \mathrm{d}\boldsymbol{\tau} = \int \frac{1}{4} \left(s^* s + p_x^* p_x + p_y^* p_y + p_z^* p_z \right) \mathrm{d}\boldsymbol{\tau} = 1$$

Die Wellenfunktionen ψ_1, ψ_2, ψ_3 und ψ_4 sind also normiert.

Insgesamt folgt also, dass für die Wellenfunktionen ψ_1, ψ_2, ψ_3 und ψ_4 die Beziehung aus Gleichung (3) erfüllt ist und diese somit normiert und orthogonal zueinander sind.