

Problem of the Week

PROBLEM 1B.

Normalization of Wavefunctions

According to valence bond theory(VBT), several orbitals form hybridized orbitals. By quantum dynamics and statistics, it is well-known that the coefficients of wavefunctions is hugely related to the ratio of electron-occupancy.

(1) Three p orbitals and single s orbital form a sp^3 hybridized orbital. Calculate the coefficients of each wavefunction s, p_x, p_y, p_z

NOTE1. The orthogonality between two wavefunction ψ_1 and ψ_2 is defined as

$$\int \psi_1 \psi_2 d\tau = 0, \text{ where } d\tau = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi.$$

NOTE2. To unify expressions, we will set that one sp^3 hybridized orbital exists along the z axis.

NOTE3. In a single atom, each orbital has different energy level and properties. Therefore, the overlap between different orbitals of a single atom is not considerable. In other words, we can approximate that all different orbitals in a single atom is orthogonal.

Background Information: Since a molecule's structure keeps changing frequently, the probability of electron-existence and occupance of each wavefunction keep changing. Therefore, even during the normalization process, we need a coefficient function, which makes the coefficient depend on time.

(2) Think of an molecule that oscillates with frequency w between state $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$. By the upper explanation, each wavefunction requires a coefficient function, $c_1(t), c_2(t), c_3(t), c_4(t)$ that makes the whole wavefunction

$\psi = c_1(t)\psi_1 + c_2(t)\psi_2 + c_3(t)\psi_3 + c_4(t)\psi_4$. Let all wavefunctions $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ are orthogonal themselves. According to molecular spectroscopy, results indicated that when $t=0$, the molecule is at state ψ_1 , $t=\pi/4$ at state ψ_2 and $t=2\pi/4$ at state ψ_3 , $t=3\pi/4$ at state ψ_4 . Find the probability that the molecule is found at state ψ_2 where $t=\pi/3$.

NOTE1. Assume an one-dimensional wavefunction.

NOTE2. Wavefunctions $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ equally contributes to the whole wavefunction ψ .

Problem of the Week

PROBLEM 1B.

Normalization of Wavefunctions

원자가 결합 이론에 따르면 여러 원자궤도함수들은 혼성화된 궤도함수를 형성한다. 양자역학과 통계학에서 파동함수에 곱해지는 계수는 전자 점유 비율에 큰 관련이 있음이 알려져 있다.

(1) 3개의 p 궤도함수와 1개의 s 궤도함수는 sp^3 혼성궤도함수를 형성한다. s, p_x, p_y, p_z 오비탈 각각에 곱해지는 계수를 계산하시오.

힌트1. 두 파동함수 ψ_1, ψ_2 의 직교성은 다음과 같이 정의한다. $\int \psi_1 \psi_2 d\tau = 0$

힌트2. 같은 원자에서 서로 다른 두 원자궤도함수의 실효 겹침은 없거나 매우 적으므로 서로 직교한다고 간주한다.

힌트3. 답안의 표현을 통일하기 위해 형성되는 4개의 sp^3 혼성궤도함수 중 하나는 z축을 따라 놓여 있다고 가정한다.

배경지식: 분자의 구조는 영원불변하지 않고 지속적으로 바뀌기에 각 상태에 대한 전자 점유 및 존재 비율 또한 지속적으로 바뀐다. 따라서 파동함수의 정규화 과정에서도 계수를 시간 t 에 의존하는 함수로서 정의해야 한다.

(2) 분자 1개가 진동수 w 를 가지고 상태 ψ_1, ψ_2, ψ_3 사이를 진동한다고 가정하자. 위의 **배경 지식**에 의해 각각의 파동함수의 계수는 시간에 의존한다. 이를 $c_1(t), c_2(t), c_3(t)$ 라고 하면, 전체 파동함수 $\psi = c_1(t)\psi_1 + c_2(t)\psi_2 + c_3(t)\psi_3$ 로 정의된다. 이때 세 파동함수 ψ_1, ψ_2, ψ_3 는 서로 직교한다고 가정하자. 분자 분광학의 결과는 $t=0$ 일 때 분자가 상태 ψ_1 에 있으며 $t=\pi/4$ 일 때 분자는 상태 ψ_2 , $t=2\pi/4$ 일 때 상태 ψ_3 , $t=3\pi/4$ 일 때 상태 ψ_4 에 존재하는 것으로 나타났다. 이때 $t=\pi/3$ 일 때 분자가 상태 ψ_2 에서 발견될 확률을 구하시오.

힌트1. 모든 파동함수는 1차원 파동함수로 간주한다.

힌트2. 파동함수 $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ 는 선형 조합 과정에서 전체 파동함수 ψ 의 형성에 동등하게 기여한다고 가정한다.