

## Part angular

A la següent taula, hi teniu representats la part angular de les diferents solucions de l'equació de Schrödinger. Com podeu veure depenen dels dos angles i dels nombres quàntic  $m_l$  i  $l$ .

Igual que per la part radial, podeu trobar molts apps a la xarxa que serveixen per representar la part angular. Aquesta és una de les que té Wolfram (<https://demonstrations.wolfram.com/HydrogenOrbitals/>), tot i que millor tenir-ho a l'escriptori. També trobareu aquesta aplicació, que més endavant també la farem servir per altres activitats, a on es veu molt bé la representació de la part angular dels orbitals atòmics <https://www.chemtube3d.com/> (mireu dins de Structure and Bonding)

**Taula 1.8** Part angular per a diferents orbitals atòmics

$l$	$m_l$	Tipus d'Orbital	$A_{l,m_l}(\theta, \phi)$
0	0	$s$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$
1	0	$p$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \theta$
	$\pm 1$	$p$	$\mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
2	0	$d$	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	$\pm 1$	$d$	$\mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi}$
	$\pm 2$	$d$	$\left(\frac{15}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$
3	0	$f$	$\left(\frac{7}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
	$\pm 1$	$f$	$\mp \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta e^{\pm i\phi}$
	$\pm 2$	$f$	$\left(\frac{105}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi}$
	$\pm 3$	$f$	$\mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^3 \theta e^{\pm i\phi}$

## Orbital tipus s

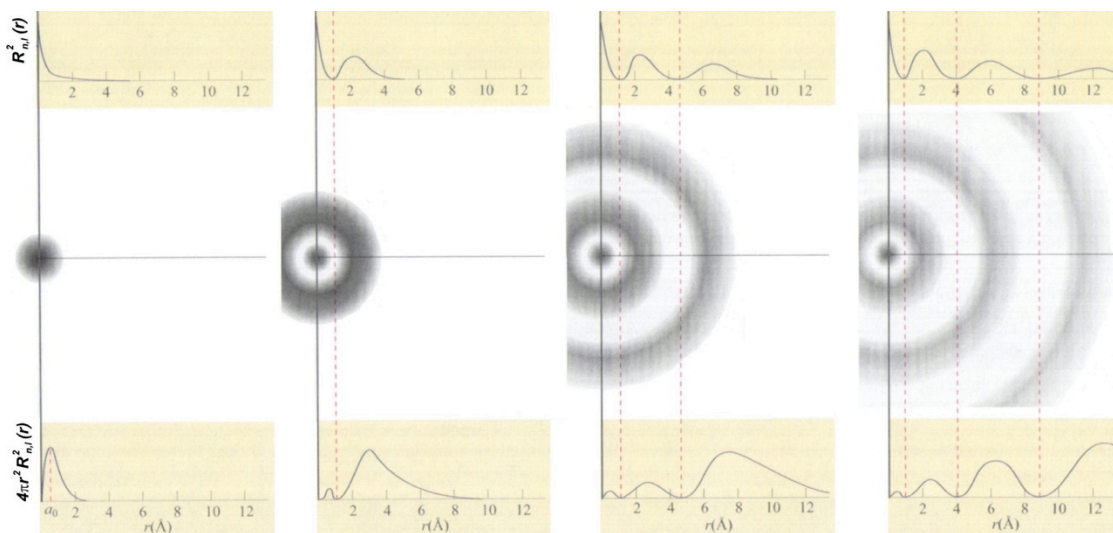
Pel que fa a la funció angular, en la taula 1.7 es pot observar que per als orbitals s és una constant:

$$A_{0,0}(\theta, \phi) = \Theta_{l,m_l}(\theta) \cdot \Phi_{m_l}(\phi) = \left( \frac{1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.1)$$

El fet que sigui una constant significa que la densitat de probabilitat de trobar l'electró a l'espai és esfèricament simètrica i no presenta cap node.



Per als orbitals s, la representació de la densitat de probabilitat (conjunta radial i angular) de trobar l'electró al voltant del nucli de l'àtom d'hidrogen ( $Z = 1$ ), en un pla determinat de l'espai, utilitzant el que es coneix com *mapes de densitat de punts*, es mostra en la figura següent, on es pot observar que per a  $n > 1$  apareixen nodes, tots ells de naturalesa radial. En general, el nombre total de nodes, radials i angulars per a un orbital és  $n-1$  (ex. orbital 2s  $\Rightarrow n = 2 \Rightarrow 2-1 = 1$  node total).



**Figura 1.1.** Representació conjunta de la funció densitat de probabilitat i de la funció distribució radial pels orbitals 1s, 2s, 3s i 4s ( $l=0$ ).<sup>1</sup>

<sup>1</sup> La funció de distribució radial indica la probabilitat de trobar l'electró a una determinada distància del nucli. És una funció obtinguda a partir de la funció d'ona, integrada (és a dir, fent una mitjana) pels angles, amb la qual cosa només depèn de la variable  $r$ . La figura 1.8 permet veure la natura de les funcions de distribució radial per a orbitals s atès que en aquest cas particular tant la funció d'ona com la densitat de probabilitat només depenen de la variable  $r$ .

Aprofitem per definir dos conceptes:

**Difusivitat** d'un orbital com la capacitat que té aquest orbital d'estendre la densitat electrònica per l'espai. Així, es pot dir que per un mateix tipus d'orbital (és a dir, pel mateix valor de  $l$ ), la difusivitat augmenta en augmentar el nombre quàntic  $n$  ( $\dots > 4s > 3s > 2s > 1s$ ;  $\dots > 4p > 3p > 2p$ ;  $\dots > 4d > 3d$ ).

**Penetrabilitat** d'un orbital que no és més que la capacitat que té aquest orbital de situar l'electró el més prop possible del nucli. D'aquesta manera, en la figura anterior es pot comprovar que per a un mateix tipus d'orbital la penetrabilitat augmenta en disminuir el nombre quàntic  $n$  ( $1s > 2s > 3s > 4s > \dots$ ;  $2p > 3p > 4p > \dots$ ;  $3d > 4d > \dots$ ).

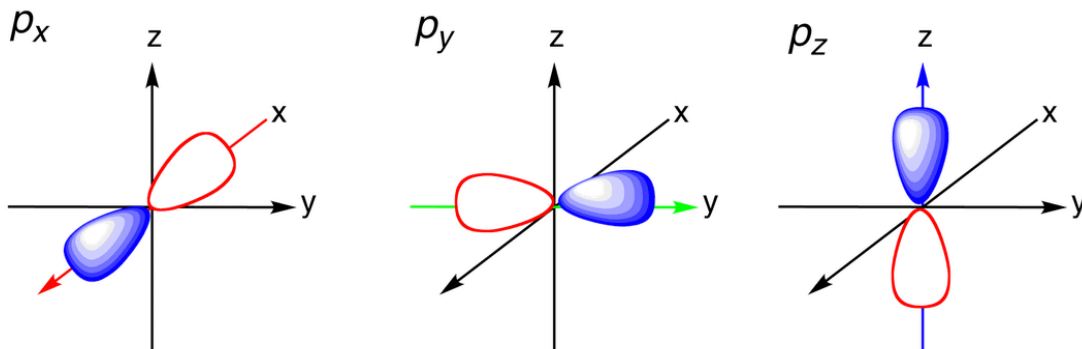
### Orbital tipus p

Si ens fixem en les equacions que defineixen els orbitals p, veiem que no són reals, si no que són imaginàries. Però podem fer una combinació lineal d'elles i continuaran sent vàlides:

**Taula 1.9** Part angular real per a orbitals p amb  $m_l \leq 0$

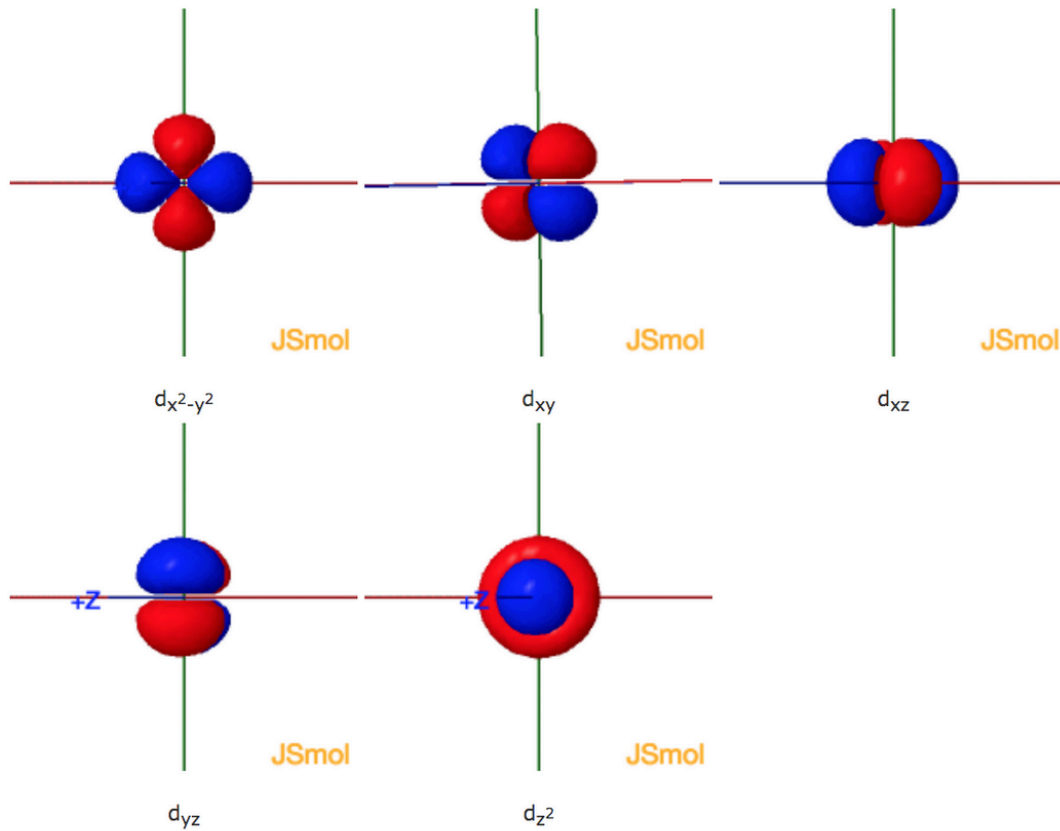
$p$	$A_{l,m_l}(\theta, \phi)$
$p_x$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \phi$
$p_y$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \sin \phi$

Per això no es pot assignar un valor de  $m_l$  als orbitals de  $p_x$  i  $p_y$  (fixeu-vos que són una combinació lineal dels dos valors).



Els canvi de color representa un canvi de signe en la funció. Fixeu-vos que aquestes tres funcions presenten un pla nodal (un pla, definit per dos eixos a on la funció és zero, mentre que en l'altre eix és a on es troba la funció).

En el cas dels orbitals tipus d, que podeu veure n'hi ha cinc de diferents (cadascun d'ells correspon a una combinació diferent de  $m_l$ ), la representació és:



**Quants plans nodals trobem ara? 2**

**Per tant, nombre de nodes angulars = l .**

En el fitxer (NodesAngulars) hi trobareu exercicis de com buscar els nodes que corresponen als diferents plans nodals.