

HIBRIDACIÓ sp^3

```
(* FUNCIÓ D'ONA DE L'ÀTOM D'HIDROGEN (a.u.) *)
Clear["Global`*"];
rad[n_, l_] := Sqrt[(2/n)^3 * (n-1-1)! / (2*n * ((n+1)!))] *
    LaguerreL[n-1-1, 2*1+1, 2*r/n] * (2*r/n)^1 * Exp[-r/n];
y[l_, ml_] := SphericalHarmonicY[l, ml,  $\theta$ ,  $\phi$ ];

(* Orbitals 2s, 2px, 2py, 2pz *)
s2 = rad[2, 0] * y[0, 0];
px = rad[2, 1] * (y[1, 1] - y[1, -1]) * (-1/Sqrt[2]);
py = rad[2, 1] * (y[1, 1] + y[1, -1]) * (1/Sqrt[2]);
pz = rad[2, 1] * y[1, 0];

(* els quatre ORBITALS HÍBRIDS  $sp^3$  *)
sp31 = (1/2) * (s2 + px + py + pz);
sp32 = (1/2) * (s2 - px - py + pz);
sp33 = (1/2) * (s2 + px - py - pz);
sp34 = (1/2) * (s2 - px + py - pz);

(* REPRESENTACIONS *)

(* Càlcul del radi de màxima probabilitat *)
f[r_] := Integrate[sp31^2 * r^2 * Sin[ $\theta$ ], { $\theta$ , 0, Pi}, { $\phi$ , 0, 2*Pi}];
rmax1 = FindRoot[D[f[r], r] == 0, {r, 4}][[1, 2]];

(* Càlcul de les superfícies dels híbrids al radi de màxima probabilitat *)
rsp31 = sp31 /. r -> rmax1;
rsp32 = sp32 /. r -> rmax1;
rsp33 = sp33 /. r -> rmax1;
rsp34 = sp34 /. r -> rmax1;

(* Plot les superfícies dels híbrids al radi de màxima probabilitat *)
fig1 = SphericalPlot3D[rsp31^2, { $\theta$ , 0, Pi}, { $\phi$ , 0, 2*Pi}, PlotRange -> All];
fig2 = SphericalPlot3D[rsp32^2, { $\theta$ , 0, Pi}, { $\phi$ , 0, 2*Pi}, PlotRange -> All];
fig3 = SphericalPlot3D[rsp33^2, { $\theta$ , 0, Pi}, { $\phi$ , 0, 2*Pi}, PlotRange -> All];
fig4 = SphericalPlot3D[rsp34^2, { $\theta$ , 0, Pi}, { $\phi$ , 0, 2*Pi}, PlotRange -> All];

(* unió de les quatre representacions *)
Show[fig1, fig2, fig3, fig4]
```

