

Ejercitación

- Ecuación de Schrödinger para átomos multielectrónicos
- Métodos aproximados
- Moléculas. La aproximación de Born-Oppenheimer
- Teoría de orbitales moleculares. Método de Hückel

Resumen

Para un átomo multielectrónico (1 único núcleo)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_{ei}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_N} \nabla_N^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j}^n \sum_{j=1}^n \frac{e^2}{r_{i,j}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n \frac{Ze^2}{r_i} \right) \Psi(q_N, q_{e1}, q_{e2}, \dots, q_{en}) = E\Psi(q_N, q_{e1}, q_{e2}, \dots, q_{en})$$

Aproximación de Born-Oppenheimer (átomos)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_{ei}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_N} \nabla_N^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j}^n \sum_{j=1}^n \frac{e^2}{r_{i,j}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n \frac{Ze^2}{r_i} \right) \Psi(q_N, q_{e1}, q_{e2}, \dots, q_{en}) = E\Psi(q_N, q_{e1}, q_{e2}, \dots, q_{en})$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_{ei}^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j}^n \sum_{j=1}^n \frac{e^2}{r_{i,j}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n \frac{Ze^2}{r_i} \right) \Psi(\vec{q}_N; \vec{q}_{e1}, \vec{q}_{e2}, \dots, \vec{q}_{en}) = E\Psi(\vec{q}_N; \vec{q}_{e1}, \vec{q}_{e2}, \dots, \vec{q}_{en})$$

Aproximación MPI

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_{ei}^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j}^n \sum_{j=1}^n \frac{e^2}{r_{i,j}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n \frac{Ze^2}{r_i} \right) \Psi(\vec{q}_N; \vec{q}_{e1}, \vec{q}_{e2}, \dots, \vec{q}_{en}) = E\Psi(\vec{q}_N; \vec{q}_{e1}, \vec{q}_{e2}, \dots, \vec{q}_{en})$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_{ei}^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n \frac{Ze^2}{r_i} \right) \Psi(\vec{q}_N; \vec{q}_{e1}, \vec{q}_{e2}, \dots, \vec{q}_{en}) = E\Psi(\vec{q}_N; \vec{q}_{e1}, \vec{q}_{e2}, \dots, \vec{q}_{en})$$

$$\sum_{i=1}^n \hat{h}_i \Psi(\vec{q}_N; \vec{q}_{e1}, \vec{q}_{e2}, \dots, \vec{q}_{en}) = E\Psi(\vec{q}_N; \vec{q}_{e1}, \vec{q}_{e2}, \dots, \vec{q}_{en})$$

$$\Psi(q_1, q_2, \dots, q_n) = \prod_{i=1}^n \Psi(q_i)$$

$$E = \sum_{i=1}^n E_i$$

Resumen

Teoría de perturbaciones

$$\hat{H}'\Psi' = E'\Psi'$$

$$\hat{H}' = \hat{H}^0 + \hat{h} \longrightarrow \text{perturbación}$$

$$\Psi'_i = \Psi_i^{(0)} + \Psi_i^{(1)} + \Psi_i^{(2)} + \dots$$

$$E'_i = E_i^{(0)} + E_i^{(1)} + E_i^{(2)} + \dots$$

Sistema no perturbado

Corrección de orden 1

Corrección de orden 2

Ejemplo: Corrección a primer orden de la energía

$$E' = \frac{\langle \Psi^{(0)} | H^0 | \Psi^{(0)} \rangle}{\langle \Psi^{(0)} | \Psi^{(0)} \rangle} + \frac{\langle \Psi^{(0)} | \hat{h} | \Psi^{(0)} \rangle}{\langle \Psi^{(0)} | \Psi^{(0)} \rangle} = E^{(0)} + E^{(1)}$$

En general es suficiente calcular la corrección de primer orden a la función de onda y las de primer y segundo orden para la energía.

Se puede demostrar que:

$$\Psi_i = \Psi_i^{(0)} + \sum_{j \neq i} \frac{\int \Psi_j^{(0)} \hat{h}_{ji} \Psi_i^{(0)} d\tau}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}} \Psi_i^{(0)} + \text{otras correcciones menores}$$

$$E_i = E_i^{(0)} + \int \Psi_i^{(0)} \hat{h}_{ii} \Psi_i^{(0)} d\tau + \sum_{j \neq i} \frac{\left| \int \Psi_j^{(0)} \hat{h}_{ji} \Psi_i^{(0)} d\tau \right|^2}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}} + \text{otras correcciones menores}$$

Ejemplo desarrollado 9.5 *Uso de la teoría de perturbaciones*

Halle la corrección de primer orden a la energía del estado fundamental para una partícula en un pozo con una variación en el potencial de la forma $V = -\epsilon \sin(\pi x/L)$, como muestra la figura 9.43.

Método Identifique el hamiltoniano de la perturbación de primer orden y evalúe $E_0^{(1)}$ con la ec. 9.65a. Esperamos un pequeño descenso de la energía pues la energía potencial promedio de la partícula es más baja en la caja distorsionada.

Respuesta El hamiltoniano de la perturbación es

$$\hat{H}^{(1)} = -\epsilon \sin(\pi x/L)$$

Entonces, la corrección de primer orden a la energía es

$$E_0^{(1)} = \int_0^L \psi_1 \hat{H}^{(1)} \psi_1 dx = -\frac{2\epsilon}{L} \int_0^L \overbrace{\sin^3 \frac{\pi x}{L}}^{4L/3\pi} dx = -\frac{8\epsilon}{3\pi}$$

Observe que la energía disminuye por la perturbación, como se espera de acuerdo en la forma que se ve en la figura 9.43.

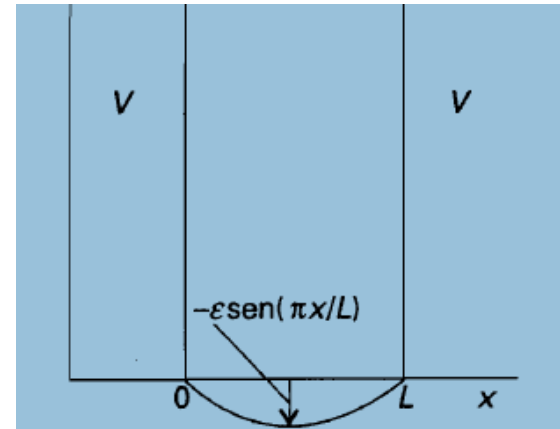


Fig. 9.43 Energía potencial para una partícula en una caja con un potencial que varía como $-\epsilon \sin(\pi x/L)$ a lo largo del piso de la caja. Es de esperar que la partícula se halle preferentemente en el centro de la caja (en el estado fundamental al menos) que en el caso de la caja sin perturbar.

$$E_0^{(1)} = \int \psi_0^{(0)*} \hat{H}^{(1)} \psi_0^{(0)} d\tau = H_{00}^{(1)}$$

Tarea

$$E_{n,x} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL_x^2}$$

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right)$$

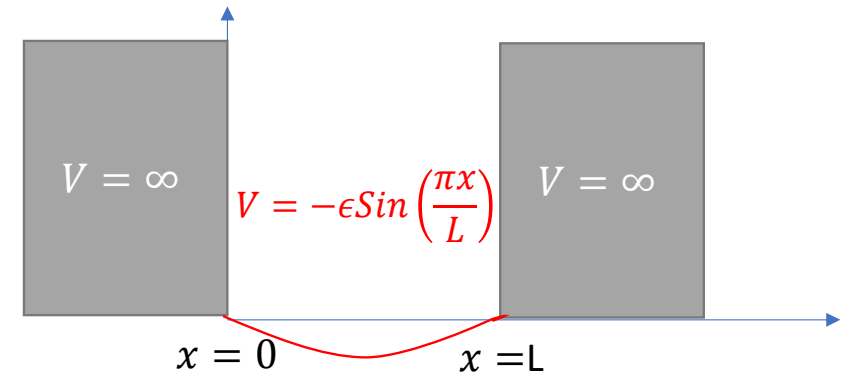
Autoevaluación 9.9 Suponga que solo ψ_3 contribuye a la distorsión de la función de onda: calcule el coeficiente c_3 y la corrección de segundo orden a la energía mediante la ec. 9.65b y la ec. 9.76 en *Información adicional 9.2*.

$$[c_3 = -8\epsilon m L^2 / 15\pi \hbar^2, E_0^{(2)} = -64\epsilon^2 m L^2 / 225\pi^2 \hbar^2]$$

Ejemplo desarrollado 9.5

$$E_{n,x} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL_x^2} \quad \Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right)$$

- Halle la corrección de primer orden a la energía del estado fundamental para una partícula en un pozo con una variación en el potencial de la forma $V = -\epsilon \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$



$$E' = \frac{\langle \Psi^{(0)} | H^0 | \Psi^{(0)} \rangle}{\langle \Psi^{(0)} | \Psi^{(0)} \rangle} + \frac{\langle \Psi^{(0)} | \hat{h} | \Psi^{(0)} \rangle}{\langle \Psi^{(0)} | \Psi^{(0)} \rangle} = E^{(0)} + E^{(1)}$$

$$E^{(1)} = \frac{\langle \Psi^{(0)} | \hat{h} | \Psi^{(0)} \rangle}{\langle \Psi^{(0)} | \Psi^{(0)} \rangle} = \frac{\langle \Psi^{(0)} | -\epsilon \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) | \Psi^{(0)} \rangle}{\langle \Psi^{(0)} | \Psi^{(0)} \rangle}$$

$$E^{(1)} = \frac{\langle \Psi_1(x) | -\epsilon \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) | \Psi_1(x) \rangle}{\langle \Psi_1(x) | \Psi_1(x) \rangle} = \langle \Psi_1(x) | -\epsilon \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) | \Psi_1(x) \rangle$$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$E^{(1)} = \int (\Psi_1(x))^* \left[-\epsilon \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right] \Psi_1(x) dx = \int \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \left[-\epsilon \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right] \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = -\frac{2\epsilon}{L} \int_0^L \sin^3\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$$

$$E^{(1)} = -\frac{2\epsilon}{L} \left(\frac{4L}{3\pi}\right) = -\frac{8\epsilon}{3\pi}$$

$$E' = E^{(0)} + E^{(1)} = \frac{\hbar^2}{8mL^2} - \frac{8\epsilon}{3\pi}$$

Ejercicio adicional

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-\beta x^2} dx = \frac{1 * (3) * \dots * (2n-1)}{2^{n+1}} \left(\frac{\pi}{\beta^{2n+1}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

- Para un oscilador anarmónico con hamiltoniano: $\hat{H}' = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 + cx^3 + dx^4$

determine la corrección de primer orden de la energía para el estado basal.

$$E' = \frac{\langle \Psi^{(0)} | H^0 | \Psi^{(0)} \rangle}{\langle \Psi^{(0)} | \Psi^{(0)} \rangle} + \frac{\langle \Psi^{(0)} | \hat{h} | \Psi^{(0)} \rangle}{\langle \Psi^{(0)} | \Psi^{(0)} \rangle} = E^{(0)} + E^{(1)} \quad E^{(1)} = \frac{\langle \Psi^{(0)} | \hat{h} | \Psi^{(0)} \rangle}{\langle \Psi^{(0)} | \Psi^{(0)} \rangle} = \frac{\langle \Psi^{(0)} | cx^3 + dx^4 | \Psi^{(0)} \rangle}{\langle \Psi^{(0)} | \Psi^{(0)} \rangle}$$

$$E^{(1)} = \frac{\langle \Psi_0(x) | cx^3 + dx^4 | \Psi_0(x) \rangle}{\langle \Psi_0(x) | \Psi_0(x) \rangle} = \langle \Psi_0(x) | cx^3 + dx^4 | \Psi_0(x) \rangle$$

$$\Psi_\nu(x) = \left(\frac{1}{2^\nu \nu! \sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \right)^{1/2} H_\nu(x) e^{-\frac{\beta x^2}{2}} \quad \beta = \sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}$$

$$E^{(1)} = \left\langle \left(\sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \right)^{1/2} H_0(x) e^{-\frac{\beta x^2}{2}} \left| cx^3 + dx^4 \right| \left(\sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \right)^{1/2} H_0(x) e^{-\frac{\beta x^2}{2}} \right\rangle = \left\langle \left(\sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{\beta x^2}{2}} \left| cx^3 + dx^4 \right| \left(\sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{\beta x^2}{2}} \right\rangle$$

$$E^{(1)} = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \left\langle e^{-\frac{\beta x^2}{2}} \left| cx^3 + dx^4 \right| e^{-\frac{\beta x^2}{2}} \right\rangle \quad E^{(1)} = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \int [cx^3 + dx^4] e^{-\beta x^2} dx = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} [cx^3 + dx^4] e^{-\beta x^2} dx = d \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\beta x^2} dx$$

$$E^{(1)} = 2d \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \int_0^{\infty} x^4 e^{-\beta x^2} dx = 2d \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \frac{3}{2^3} \left(\frac{\pi}{\beta^5} \right)^{1/2} = \frac{3\pi}{4\beta^2} \longrightarrow E' = E^{(0)} + E^{(1)} = \frac{1}{2} h\nu + \frac{3d}{4\beta^2}$$

Moléculas

Ejemplo desarrollado 11.1 Normalización de un orbital molecular

Normalice el orbital molecular ψ_+ en la ec. 11.7.

$$\psi_{\pm} = N(A \pm B)$$

Método Debemos encontrar el factor N de modo que

$$\int \psi^* \psi d\tau = 1$$

Para ello debemos introducir la CLOA en esta integral y tener en cuenta que los orbitales atómicos están normalizados en forma individual.

Respuesta Al sustituir la función de onda, encontramos que

$$\int \psi^* \psi d\tau = N^2 \left\{ \int A^2 d\tau + \int B^2 d\tau + 2 \int AB d\tau \right\} = N^2(1 + 1 + 2S)$$

donde $S = \int AB d\tau$. Para que la integral sea igual a 1, se requiere que

$$N = \frac{1}{\{2(1 + S)\}^{1/2}}$$

En H_2^+ , $S \approx 0,59$, por lo tanto $N = 0,56$.

Tarea:

Autoevaluación 11.3 Normalice el orbital ψ_- de la ec. 11.7.

$$[N = 1/\{2(1 - S)\}^{1/2}, \text{ por lo que } N = 1,10]$$

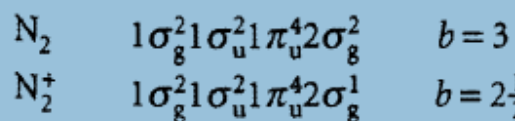
Moléculas

Ejemplo desarrollado 11.2 Estimación de la fuerza enlazante relativa de moléculas y iones

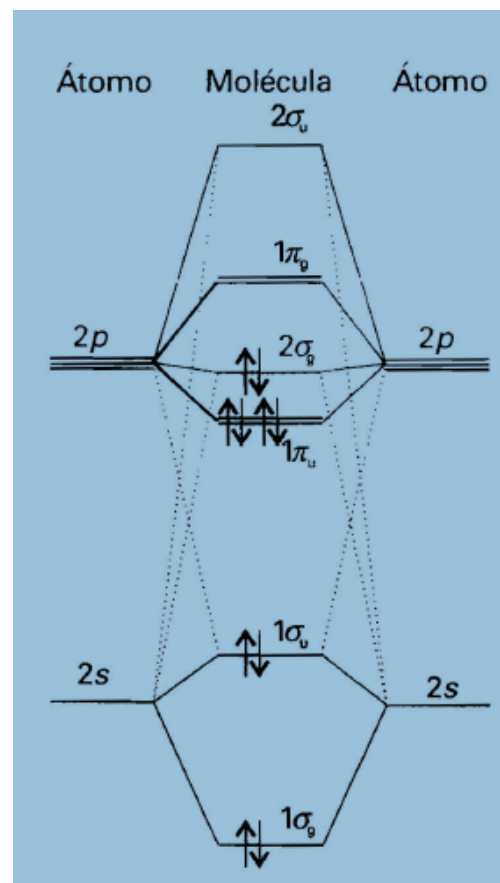
Estime si la energía de disociación del N_2^+ será mayor o menor que la del N_2 .

Método Sabiendo que la molécula con mayor orden enlazante tendrá mayor energía de disociación, compare la configuración electrónica y determine el orden enlazante de cada una.

Respuesta De acuerdo con la figura 11.33, las configuraciones electrónicas y órdenes enlazante son



Dado que el catión tiene menor orden enlazante, suponemos que tiene la menor energía de disociación. La energía de disociación experimental del N_2 es de 945 kJ mol^{-1} , y la del N_2^+ es de 842 kJ mol^{-1} .



Tarea:

Autoevaluación 11.4 ¿Qué molécula tendrá mayor energía de disociación, F_2 o F_2^+ ?
 $[F_2^+]$

Moléculas

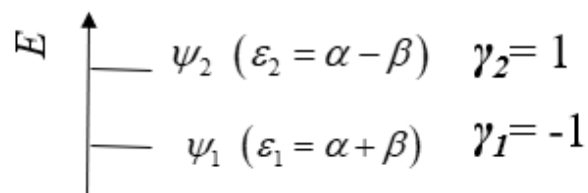
Método de Hückel

Energía de deslocalización: La energía del OM π enlazante del etileno es $\alpha + \beta$. Ya que en este OM hay dos electrones, la energía π total es $2\alpha + 2\beta$. Esta energía corresponde a un enlace aislado. En un sistema conjugado que tuviera n enlaces π , la energía π localizada sería $n(2\alpha + 2\beta)$. Se define la energía de deslocalización como la diferencia entre la energía total π del sistema y aquella que tendría si estuviera totalmente localizado.

Ejemplo desarrollado 11.5 Estimación de la energía de deslocalización

Utilice la aproximación de Hückel para hallar las energías de los orbitales π del ciclobutadieno y estime la energía de deslocalización.

Para el eteno:



$$\gamma = \frac{\alpha - \epsilon}{\beta} \quad \boxed{\epsilon = \alpha - \gamma\beta}$$

Método Tome el determinante secular del mismo modo que para el butadieno, pero teniendo en cuenta que los átomos A y D también son contiguos. Halle luego las raíces de la ecuación secular y determine la energía total de los enlaces π . Para calcular la energía de deslocalización, se resta la energía de dos enlaces π de la energía total enlazantes los π .

Respuesta La matriz hamiltoniana es

$$H = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

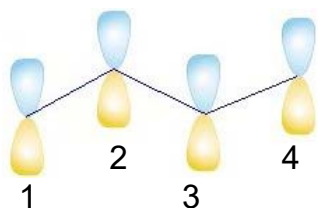
Mediante la diagonalización se obtienen las energías de los orbitales

$$E = \alpha + 2\beta, \quad \alpha, \quad \alpha, \quad \alpha - 2\beta$$

Se deben acomodar cuatro electrones. Dos electrones ocupan el orbital de menor energía (de energía $\alpha + 2\beta$), y dos electrones ocupan los orbitales de degeneración doble (de energía α). Por lo tanto, la energía total es $4\alpha + 4\beta$. Dos enlaces π aislados tendrían una energía de $4\alpha + 4\beta$; por lo tanto, en este caso la energía de deslocalización es cero.

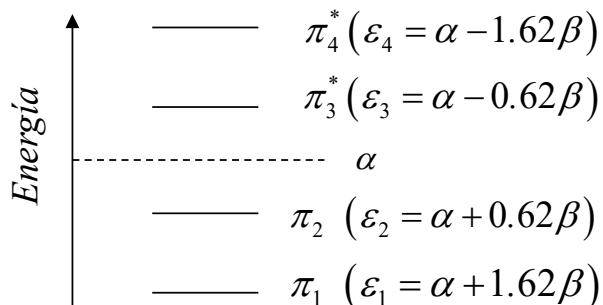
Ejercicio:

Utilizando el método de Hückel para el butadieno (su anion y su cation) determine la energía de cada OM, la energía total π del sistema, los coeficientes de expansión, los órdenes de enlace π y total, la densidad electrónica π , la carga π efectiva sobre cada átomo y la energía de delocalización.



$$\begin{vmatrix} \gamma & 1 & 0 & 0 \\ 1 & \gamma & 1 & 0 \\ 0 & 1 & \gamma & 1 \\ 0 & 0 & 1 & \gamma \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 1.62 \\ \gamma_2 &= 0.62 \\ \gamma_3 &= -0.62 \\ \gamma_4 &= -1.62 \end{aligned}$$



$$\gamma = \frac{\alpha - \varepsilon}{\beta} \quad \boxed{\varepsilon = \alpha - \gamma\beta}$$

$$\tilde{\varepsilon}_{(+)}^{\pi} = 2\varepsilon_1 + 1\varepsilon_2 = 3\alpha + 3.86\beta$$

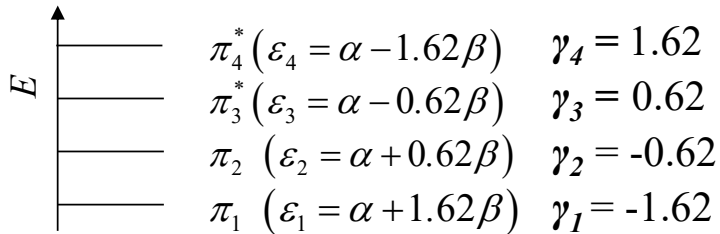
$$ED_{(+)}^{\pi} = 1.86\beta$$

$$\tilde{\varepsilon}_{(0)}^{\pi} = 2\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 = 4\alpha + 4.48\beta$$

$$ED_{(0)}^{\pi} = 0.48\beta$$

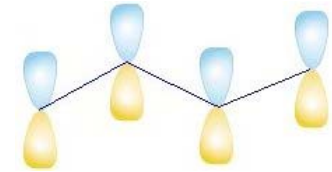
$$\tilde{\varepsilon}_{(-)}^{\pi} = 2\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 + 1\varepsilon_3 = 5\alpha + 3.86\beta$$

$$ED_{(-)}^{\pi} = -0.14\beta$$



$$\psi_i = \sum_{i=1}^n c_{\mu i} \phi_i$$

$$\psi_i = c_{i1} \phi_1 + c_{i2} \phi_2 + c_{i2} \phi_2 + \dots$$



$$\begin{vmatrix} \gamma & 1 & 0 & 0 \\ 1 & \gamma & 1 & 0 \\ 0 & 1 & \gamma & 1 \\ 0 & 0 & 1 & \gamma \end{vmatrix} = 0$$

$$\gamma c_1 + c_2 = 0$$

$$c_1 + \gamma c_2 + c_3 = 0$$

$$c_2 + \gamma c_3 + c_4 = 0$$

$$c_3 + \gamma c_4 = 0$$

$$c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2 = 1$$

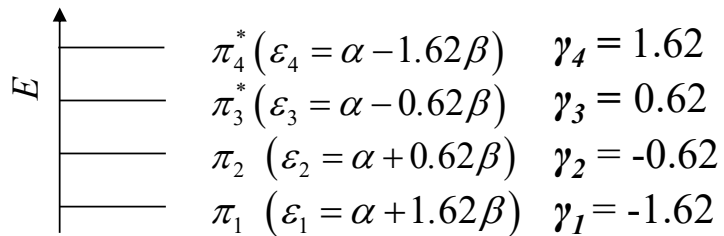
Mediante un programa matemático diagonalizamos la matriz y obtenemos E:

$$E = \begin{vmatrix} \alpha + 1.62\beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha + 0.62\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha - 0.62\beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha - 1.62\beta \end{vmatrix} = 0$$

Y la matriz con la que se logra la diagonalización es:

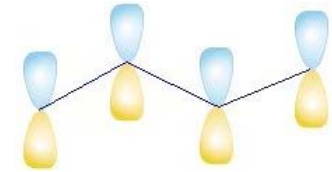
$$C = \begin{vmatrix} 0.372 & 0.602 & 0.602 & -0.372 \\ 0.602 & 0.372 & -0.372 & 0.602 \\ 0.602 & -0.372 & -0.372 & -0.602 \\ 0.372 & -0.602 & 0.602 & 0.372 \end{vmatrix}$$

Coeficientes C_{ij}



$$\psi_i = \sum_{i=1}^n c_{\mu i} \phi_i$$

$$\psi_i = c_{i1}\phi_1 + c_{i2}\phi_2 + c_{i2}\phi_2 + \dots$$



$$C = \begin{vmatrix} 0.372 & 0.602 & 0.602 & -0.372 \\ 0.602 & 0.372 & -0.372 & 0.602 \\ 0.602 & -0.372 & -0.372 & -0.602 \\ 0.372 & -0.602 & 0.602 & 0.372 \end{vmatrix}$$

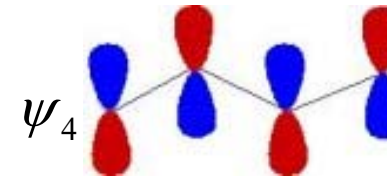
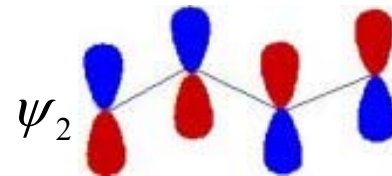
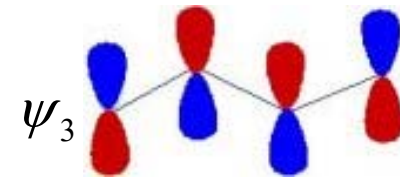
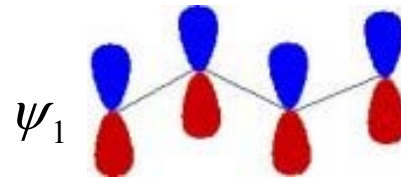
Coeficientes c_{ij}

$$\psi_1 = 0.37\phi_1 + 0.60\phi_2 + 0.60\phi_3 + 0.37\phi_4 \quad 0 \text{ nodos}$$

$$\psi_2 = 0.60\phi_1 + 0.37\phi_2 - 0.37\phi_3 + 0.60\phi_4 \quad 1 \text{ nodo}$$

$$\psi_3 = 0.60\phi_1 - 0.37\phi_2 - 0.37\phi_3 + 0.60\phi_4 \quad 2 \text{ nodos}$$

$$\psi_4 = 0.37\phi_1 - 0.60\phi_2 + 0.60\phi_3 - 0.37\phi_4 \quad 3 \text{ nodos}$$

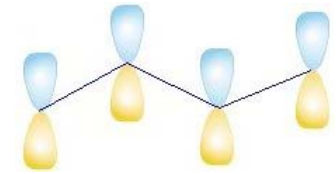


$$P_{ab}^{\pi} = \sum_{i=1}^{occ} n_i c_{ia} c_{ib}$$

$$P_{ab} = P_{ab}^{\pi} + 1$$

$$\rho_a^{\pi} = \sum_{i=1}^{occ} n_i |c_{ia}|^2$$

$$q_a^{\pi} = \eta_a - \rho_a^{\pi}$$



$$\psi_1 = 0.37\phi_1 + 0.60\phi_2 + 0.60\phi_3 + 0.37\phi_4$$

$$\psi_3 = 0.60\phi_1 - 0.37\phi_2 - 0.37\phi_3 + 0.60\phi_4$$

$$\psi_2 = 0.60\phi_1 + 0.37\phi_2 - 0.37\phi_3 + 0.60\phi_4$$

$$\psi_4 = 0.37\phi_1 - 0.60\phi_2 + 0.60\phi_3 - 0.37\phi_4$$

Ordenes de enlace π :

$$P_{12}^{\pi} = 0.89 \quad P_{12}^{tot} = 1.89$$

$$P_{12}^{\pi(+)} = 0.67 \quad P_{12}^{tot(+)} = 1.67$$

$$P_{12}^{\pi(-)} = 0.67 \quad P_{12}^{tot(-)} = 1.67$$

$$P_{23}^{\pi} = 0.45 \quad P_{23}^{tot} = 1.45$$

$$P_{23}^{\pi(+)} = 0.58 \quad P_{23}^{tot(+)} = 1.58$$

$$P_{23}^{\pi(-)} = 0.58 \quad P_{23}^{tot(-)} = 1.58$$

$$P_{34}^{\pi} = 0.89 \quad P_{34}^{tot} = 1.89$$

$$P_{34}^{\pi(+)} = 0.58 \quad P_{34}^{tot(+)} = 1.58$$

$$P_{34}^{\pi(-)} = 0.67 \quad P_{34}^{tot(-)} = 1.67$$

Densidad electrónica π :

$$\rho_1^{\pi} = 1 \quad \rho_3^{\pi} = 1$$

$$\rho_1^{\pi(+)} = 0.63 \quad \rho_3^{\pi(+)} = 0.86$$

$$\rho_1^{\pi(-)} = 1.35 \quad \rho_3^{\pi(-)} = 1.13$$

$$\rho_2^{\pi} = 1 \quad \rho_4^{\pi} = 1$$

$$\rho_2^{\pi(+)} = 0.86 \quad \rho_4^{\pi(+)} = 0.63$$

$$\rho_2^{\pi(-)} = 1.13 \quad \rho_4^{\pi(-)} = 1.35$$

Carga π efectiva:

$$q_1^{\pi} = 0 \quad q_3^{\pi} = 0$$

$$q_1^{\pi(+)} = +0.37 \quad q_3^{\pi(+)} = +0.14$$

$$q_1^{\pi(-)} = -0.35 \quad q_3^{\pi(-)} = -0.13$$

$$q_2^{\pi} = 0 \quad q_4^{\pi} = 0$$

$$q_2^{\pi(+)} = +0.14 \quad q_4^{\pi(+)} = +0.37$$

$$q_2^{\pi(-)} = -0.13 \quad q_4^{\pi(-)} = -0.35$$

Tarea:

Utilizando el método de Hückel para el ciclobutadieno determine la energía de cada OM, la energía total π del sistema, los coeficientes de expansión, los órdenes de enlace π y total, la densidad electrónica π , la carga π efectiva sobre cada átomo y la energía de delocalización.

Prediga que especie será más estable si la neutra, el catión o el anión.

Determinantes: <https://es.symbolab.com/solver/matrix-determinant-calculator>

Raíces: <https://es.symbolab.com/solver/roots-calculator>