

Sección que incluye propuestas novedosas para el cálculo de conceptos o propiedades de los sistemas químicos

Un método sencillo para calcular la energía de los orbitales moleculares de polienos tipo Hückel y Möbius

Barbara Gordillo*

Abstract

In Molecular Orbital Theory of conjugated π electron systems, the Frost, Baker, and Zimmerman mnemonic circles are useful to describe, in a *qualitative* manner, the molecular orbital distribution energy of conjugated Hückel and Möbius molecules.

In this work, it is described an easy method to *quantitate* the molecular orbital energies of conjugated Hückel and Möbius systems by using modified mnemonic circles.

Introducción

En la teoría de los orbitales moleculares de sistemas conjugados de tipo π , el tratamiento regular de las ecuaciones seculares se complica conforme aumenta el tamaño del polieno (Salem, 1966; Heilbronner y Bock, 1976; Borden, 1975). Sin embargo, este tratamiento puede ser simplificado usando los círculos nemotécnicos de Frost (1953) y Baker (1984), como se muestra en la figura 1.

Los métodos de Frost y Baker son útiles para des-

cribir la distribución de la energía de los orbitales moleculares de los sistemas conjugados tipo Hückel de una manera cualitativa, aunque desafortunadamente no en forma cuantitativa. Un método similar fue propuesto por Zimmerman (1971) para sistemas de tipo Möbius.

En este trabajo se describe un método fácil de calcular los valores de la energía de los orbitales moleculares de sistemas conjugados tipo Hückel y Möbius usando los círculos nemotécnicos modificados.

Método propuesto

Para calcular la energía de los orbitales moleculares de moléculas cíclicas y acíclicas que contienen sistemas π de tipo Hückel, se siguen las reglas descritas a continuación:

1. *Cíclicas.* Inscriba la molécula en un círculo de radio 2β con uno de los átomos en la parte inferior del círculo, de manera similar al método de Frost.

Acíclicas. En este caso dibuje la molécula en el círculo de radio 2β , adicionando $n + 2$ átomos fantasmas (donde n es el número de átomos del sistema a analizar), de forma de conseguir una figura cíclica a partir de la acíclica. Aquí la posición del átomo en la parte inferior del círculo deberá ser ocupada por uno de los átomos fantasmas.

2. Ponga números etiqueta a los átomos 0, 1, 2, 3... etcétera, en la mitad del círculo, empezando por el átomo en la parte inferior, sin importar si esta posición está ocupada por un átomo fantasma (polieno acíclico) o real (polieno cíclico).

3. La energía, en términos de α y β , se calcula usando la siguiente fórmula:

$$E = \alpha + 2 \beta \cos\theta$$

Donde
$$\theta = \frac{360 A}{N}$$

Siendo $N =$ Número total de átomos inscritos en el círculo.

$A =$ Número de etiqueta en el átomo.

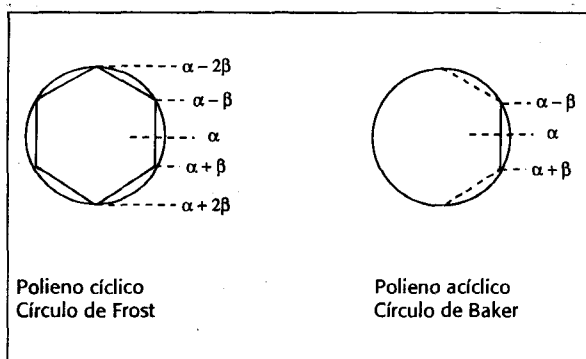


Figura 1. Círculos nemotécnicos que describen la energía de los orbitales moleculares de sistemas conjugados de tipo Hückel.

*Departamento de Química del Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Av. IPN esq. Ticomán, Col. Zacatenco, México 07000 D.F., Apdo. Postal 14-740.

Recibido: 17 de agosto de 1995;

Aceptado: 25 de septiembre de 1995.

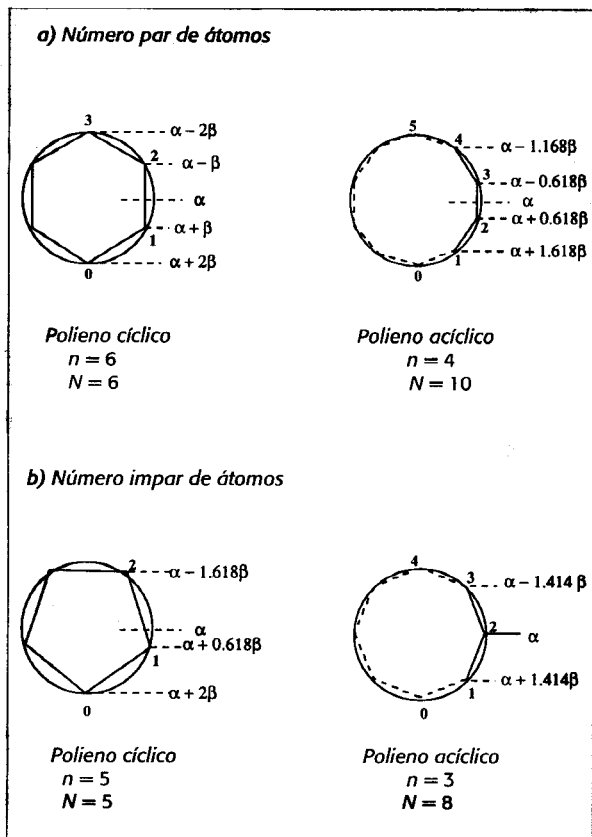


Figura 2. Círculos nemotécnicos modificados usados para calcular la energía de los orbitales moleculares de sistemas de tipo Hückel.

Algunos ejemplos donde se han aplicado estas reglas se presentan en la figura 2.

Como una extensión del método, la energía de sistemas tipo Möbius puede calcularse siguiendo los pasos:

1. Inscriba al polieno cíclico en un círculo de radio 2β , de manera que no haya átomos en la parte inferior del mismo.

2. Ponga números etiqueta impares a los átomos 1, 3, 5, ... etcétera en la mitad del círculo.

3. Calcule la energía con la misma fórmula que en los sistemas tipo Hückel:

$$E = \alpha + 2\beta \cos \theta$$

Sin embargo aquí θ se calcula con la fórmula:

$$\theta = \frac{180 A}{N}$$

Donde N = Número total de átomos inscritos en el círculo (igual a n , que es el número total de átomos de la molécula).

A = Número de etiqueta en el átomo.

Algunos ejemplos se presentan en la Figura 3.

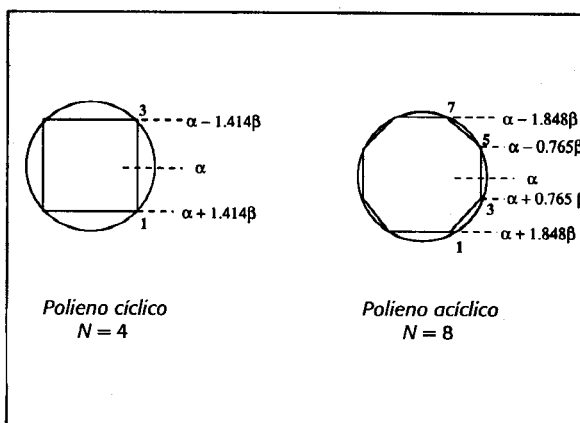


Figura 3. Círculos nemotécnicos modificados usados para calcular la energía de los orbitales moleculares de sistemas de tipo Möbius.

Referencias

- Baker, A.D. y Baker, M.D., A Geometric Method for Determining the Hückel Molecular Orbital Energy Levels of Open-Chain, Fully Conjugated Molecules, *J. Chem. Educ.*, **61**, 770, 1984.
- Borden, W.T., *Modern Molecular Orbital Theory for Chemists*, Prentice Hall Inc., Nueva Jersey, 1975.
- Frost, A.A. y Musulin, B.A., Mnemonic Device for Molecular Orbital Energies, *J. Chem. Phys.*, **21**, 572-573, 1953.
- Salem, L., *The Molecular Orbital Theory of Conjugated Systems*, Benjamin, Nueva York, 1966. Capítulo 1.
- Zimmerman, H.E., The Möbius-Hückel Concept in Organic Chemistry. Application to Organic Molecules and Reactions, *Acc. Chem. Res.*, **4**, 272-280, 1971. ■