

Análisis de Estados Electrónicos en Moléculas

Modelo Tight-Binding (Hückel)

Dimetilbenceno y Fragmento de Grafeno (Pino de Navidad)

Parámetros del modelo:

- Energía de sitio: $\epsilon = 0$
- Salto entre vecinos: $\pi = -1$
- Hamiltoniano: modelo de Hückel para electrones π

Dimetilbenceno (8 átomos):

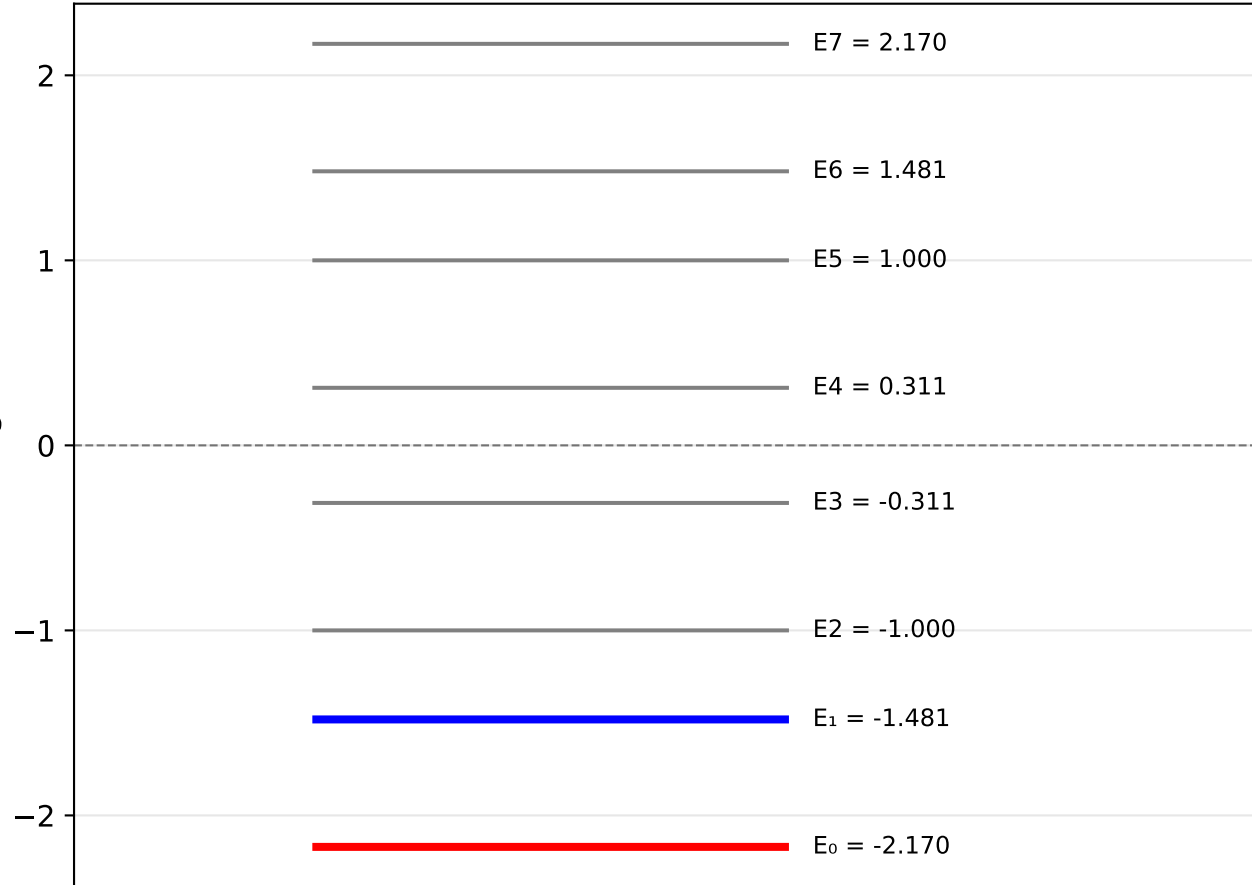
- Energía estado base (E_0): -2.170086
- Energía primer excitado (E_1): -1.481194
- Gap de energía: $\Delta E = 0.688892$

Pino de Grafeno (24 átomos):

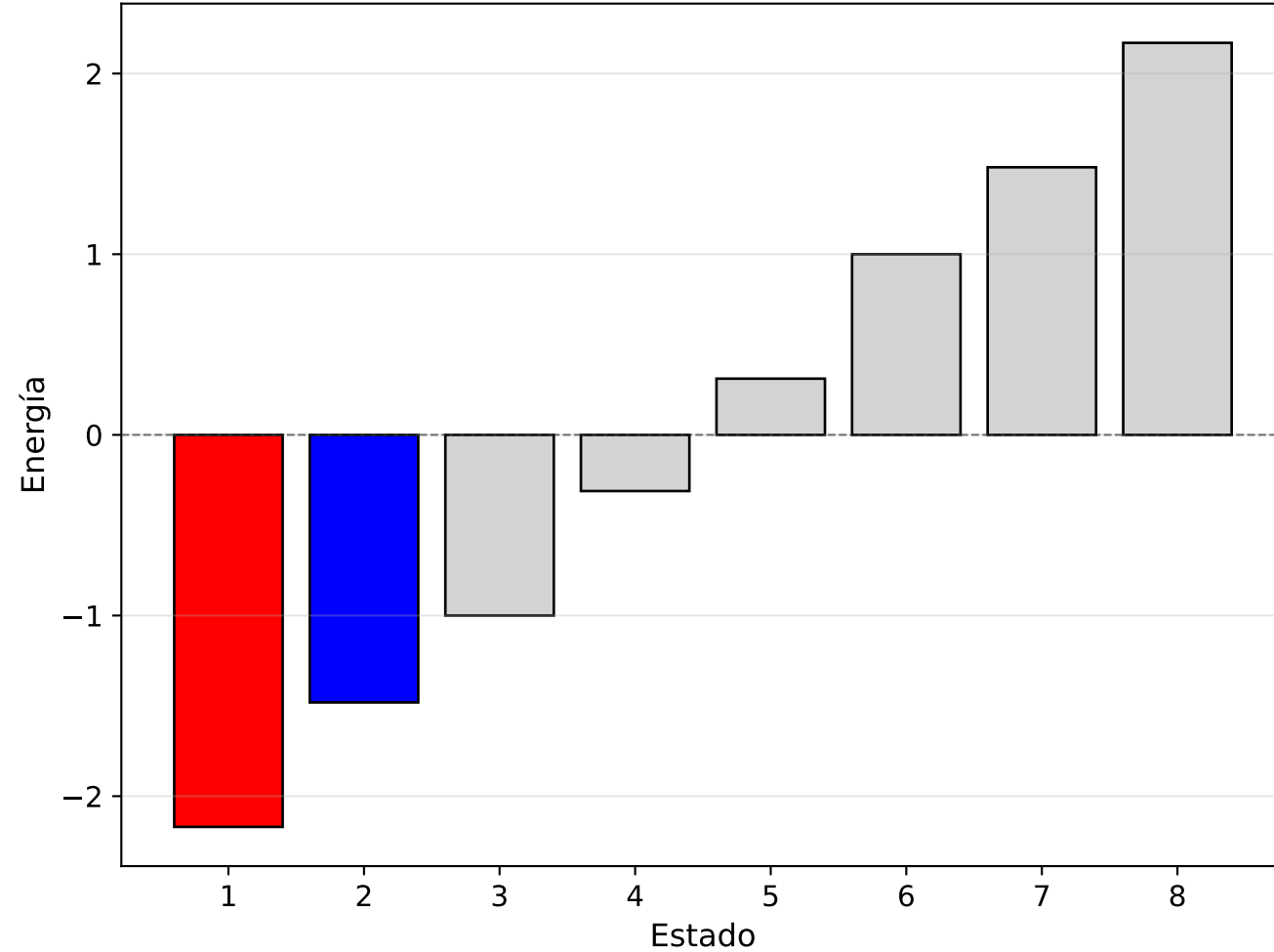
- Energía estado base (E_0): -3.586617
- Energía primer excitado (E_1): -2.819141
- Gap de energía: $\Delta E = 0.767476$

DIMETILBENCENO - Análisis de Energías

Espectro de Energías - Dimetilbenceno

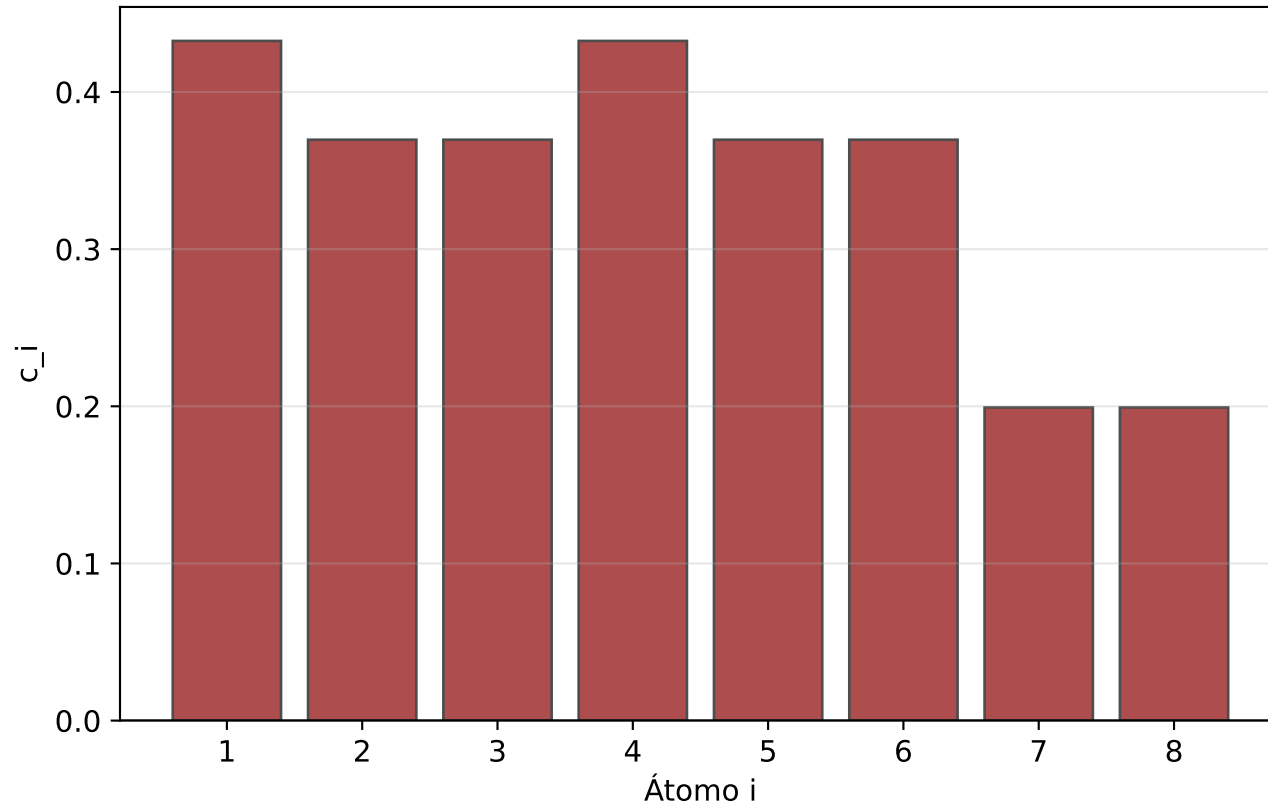


Distribución de Energías

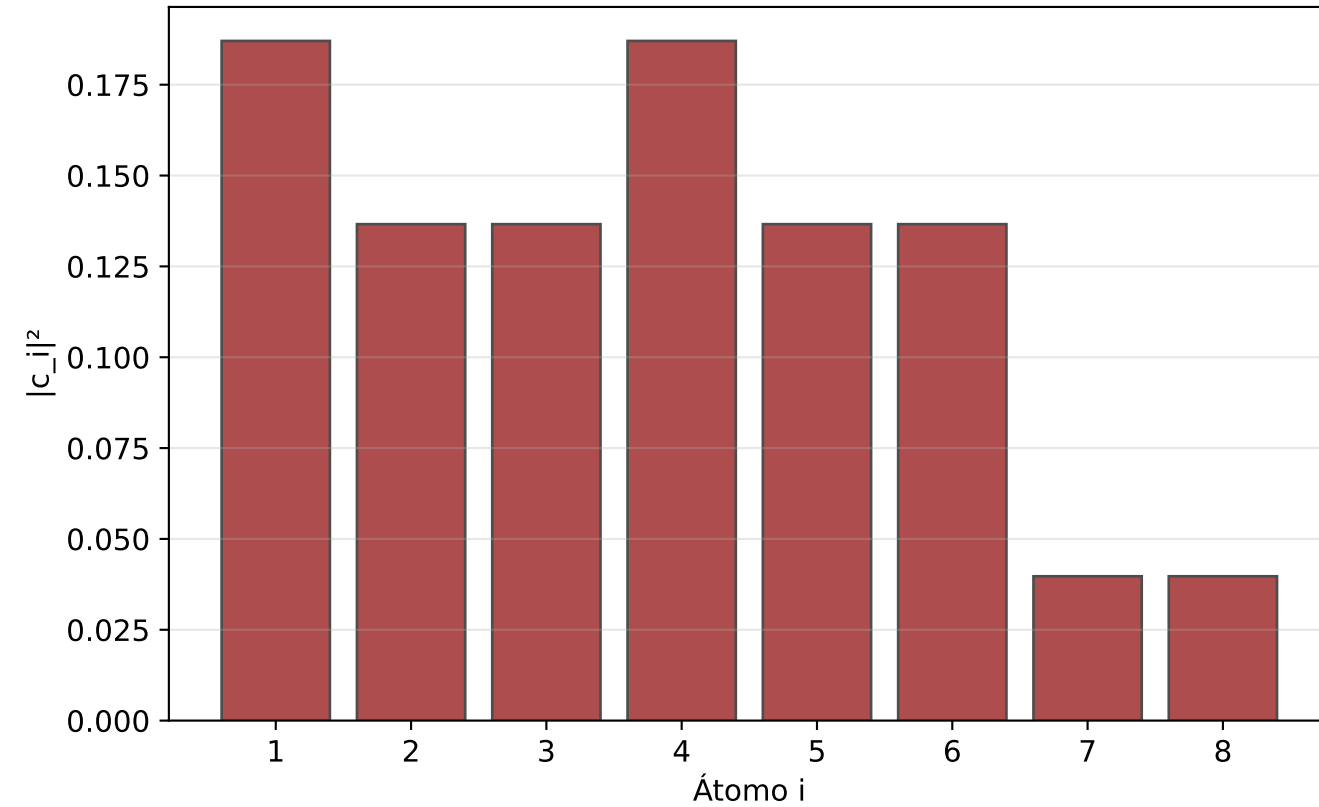


DIMETILBENCENO - Funciones de Onda: $\psi = \sum c_i \varphi_i$

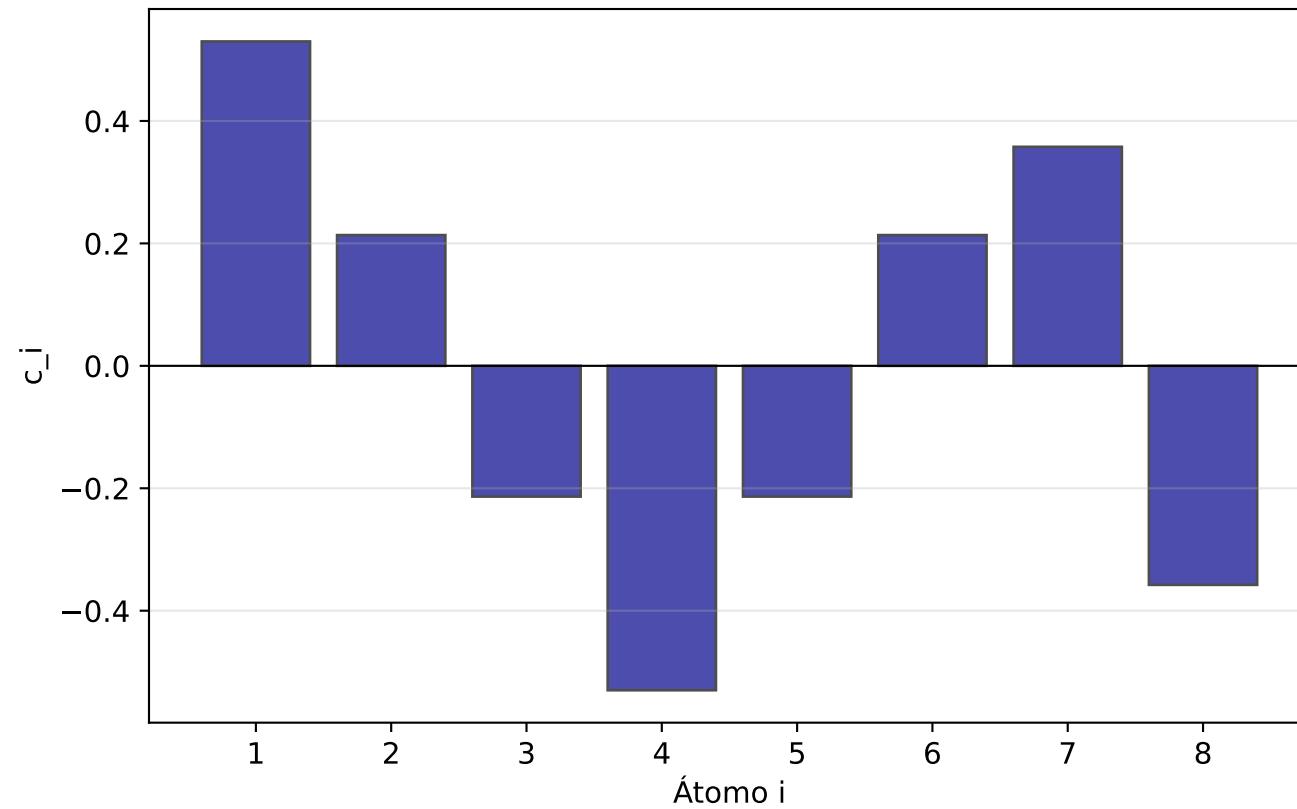
Estado Base ($E_0 = -2.170$)
Coeficientes de la función de onda



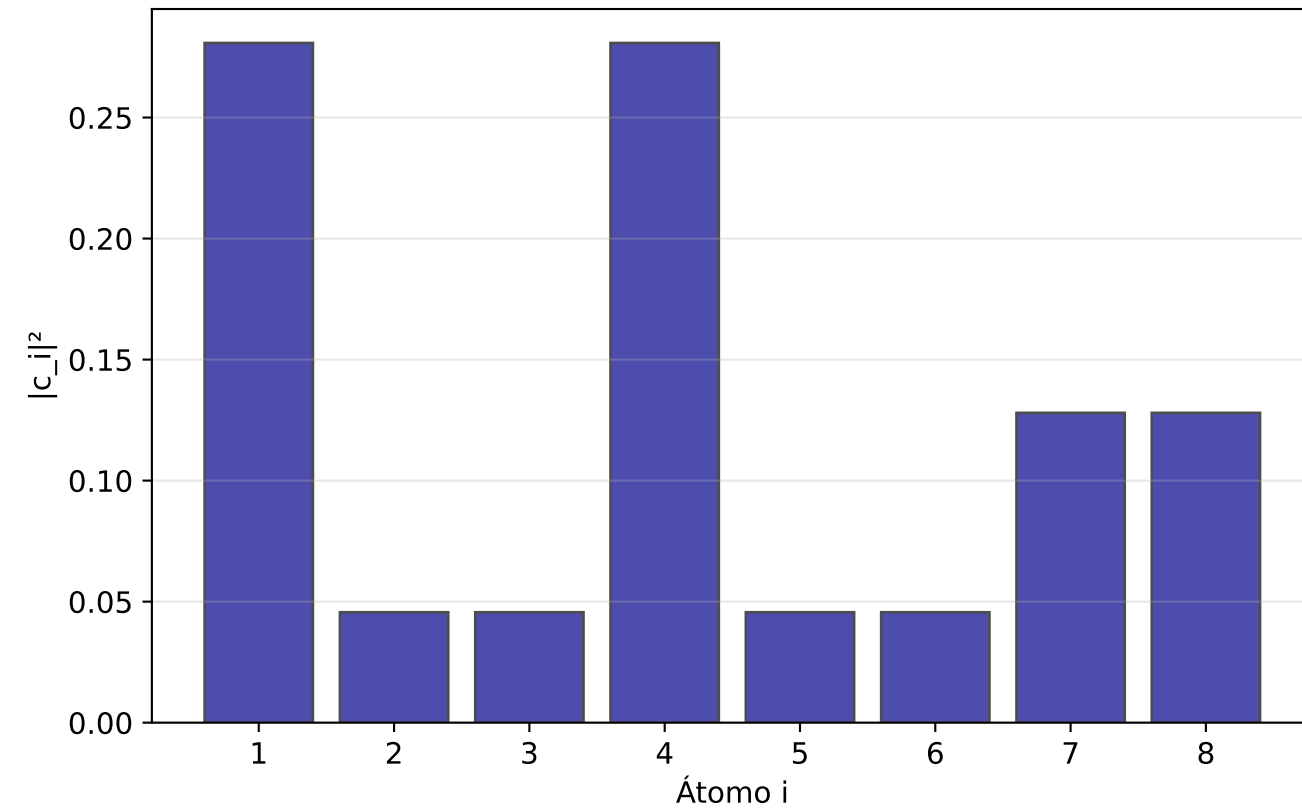
Estado Base ($E_0 = -2.170$)
Densidad de probabilidad



Primer Excitado ($E_1 = -1.481$)
Coeficientes de la función de onda

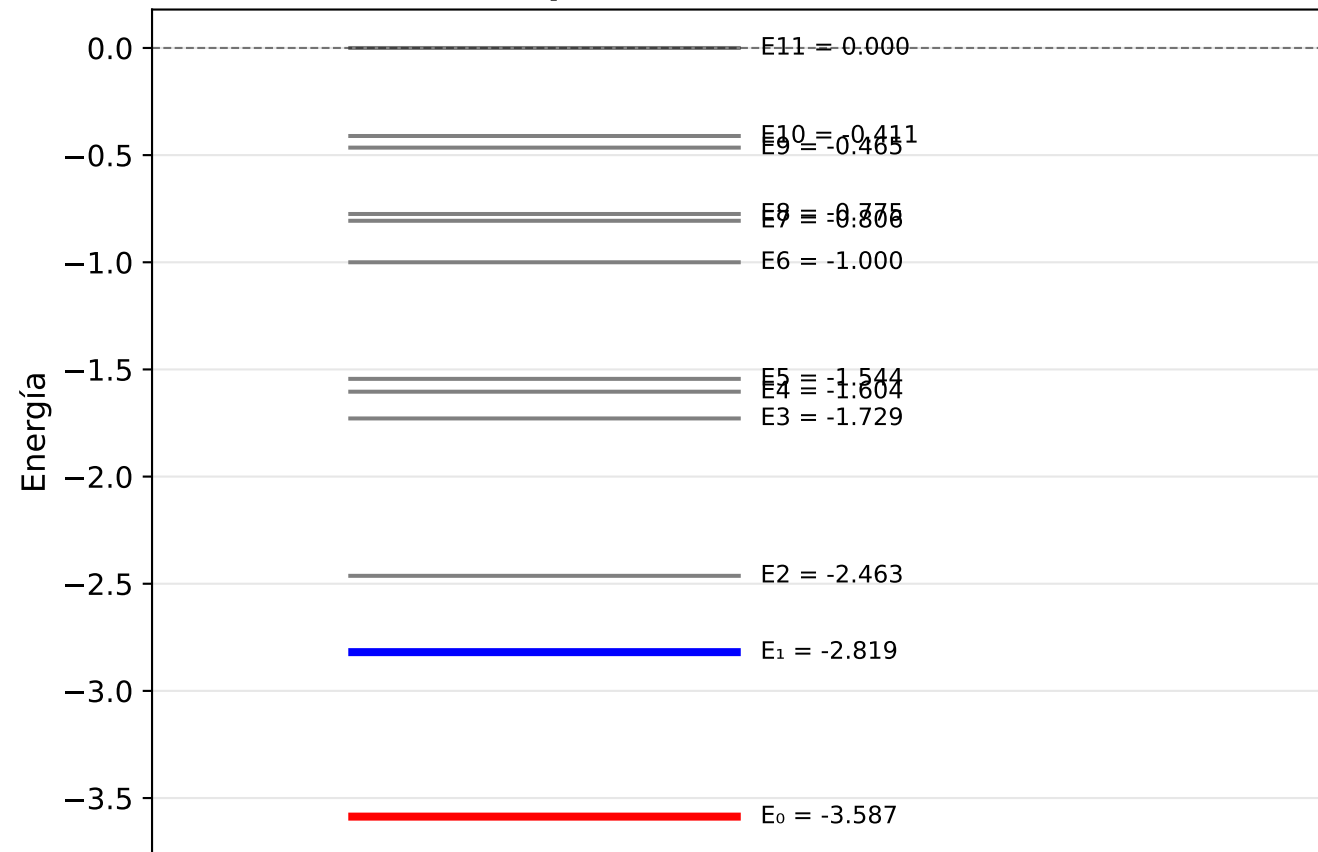


Primer Excitado ($E_1 = -1.481$)
Densidad de probabilidad

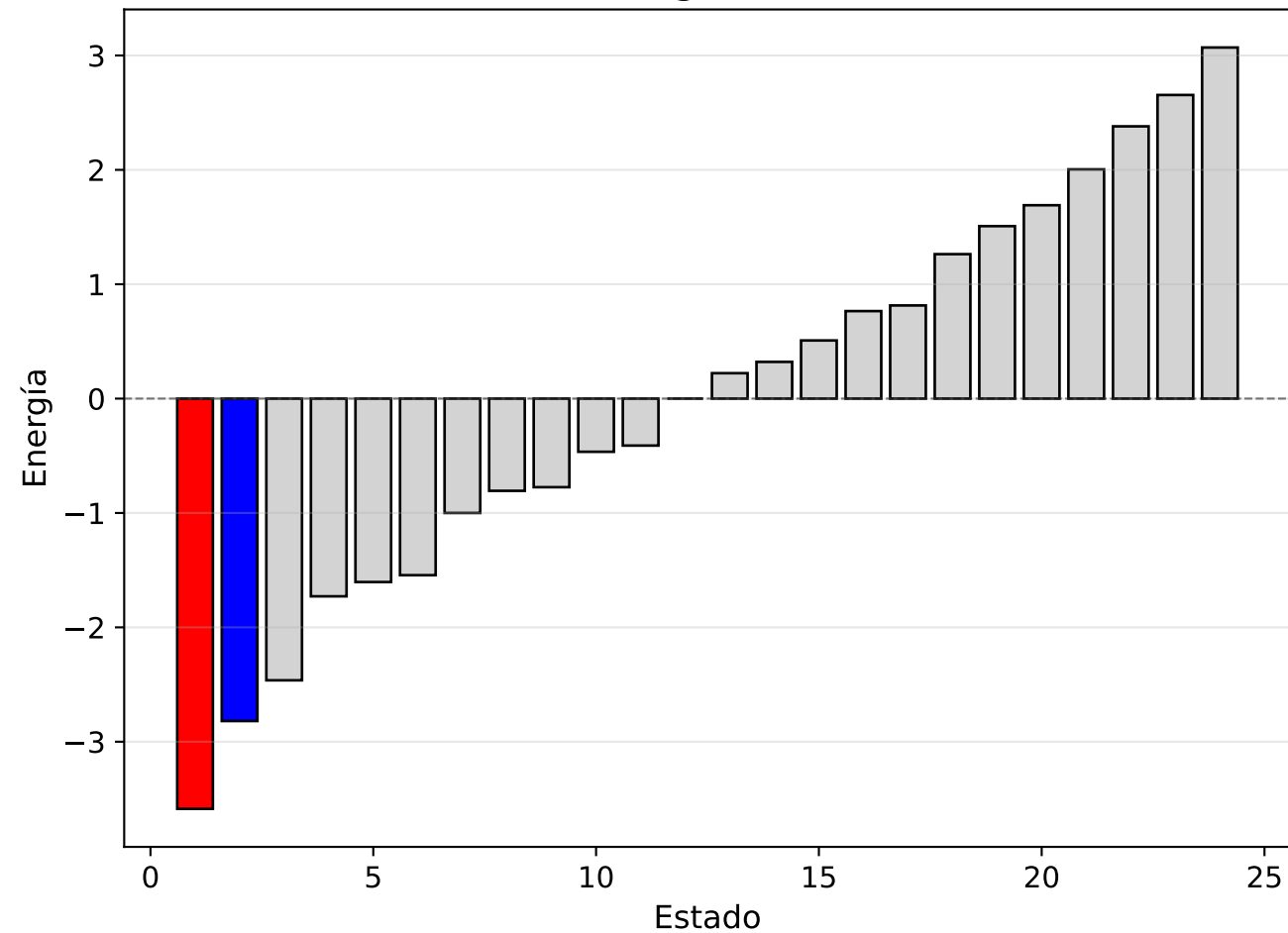


PINO DE GRAFENO - Análisis de Energías

Espectro de Energías - Pino de Grafeno (primeros 12 niveles)

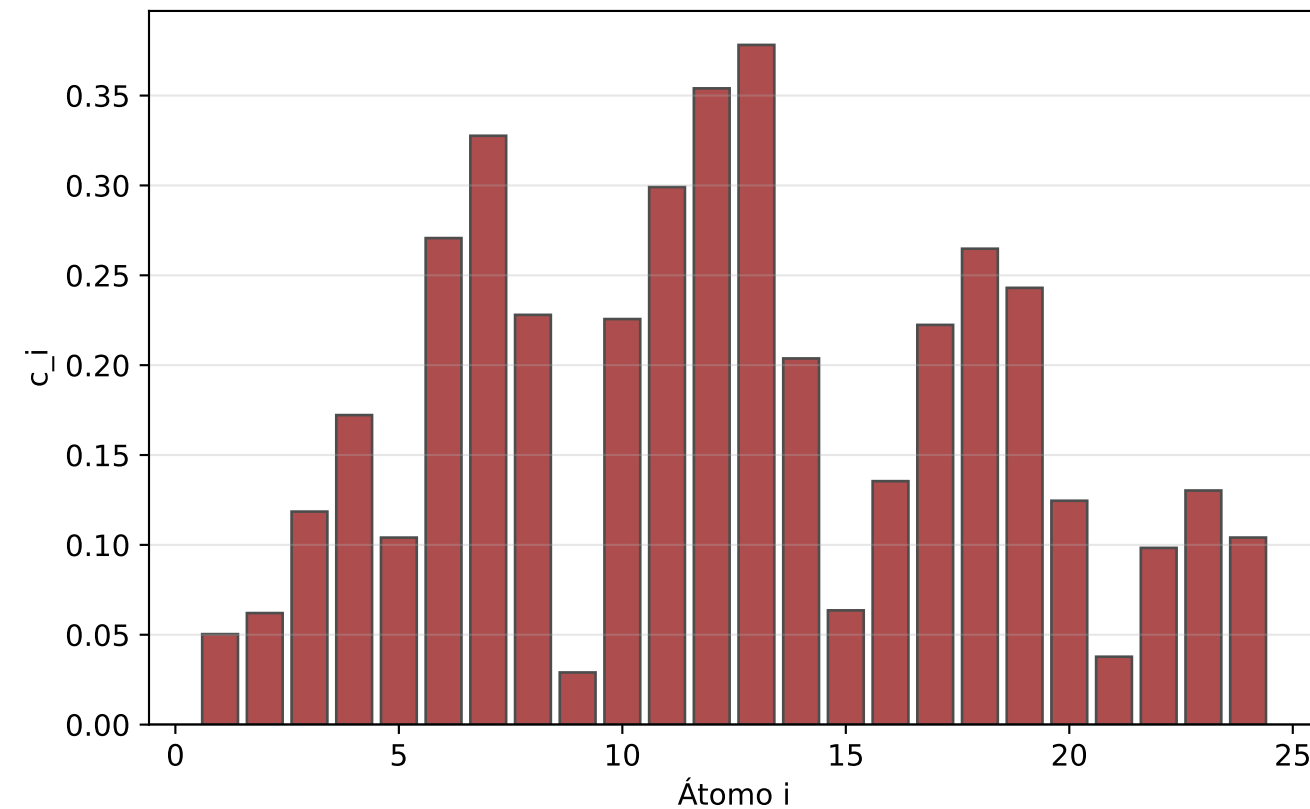


Distribución de Energías (todos los estados)

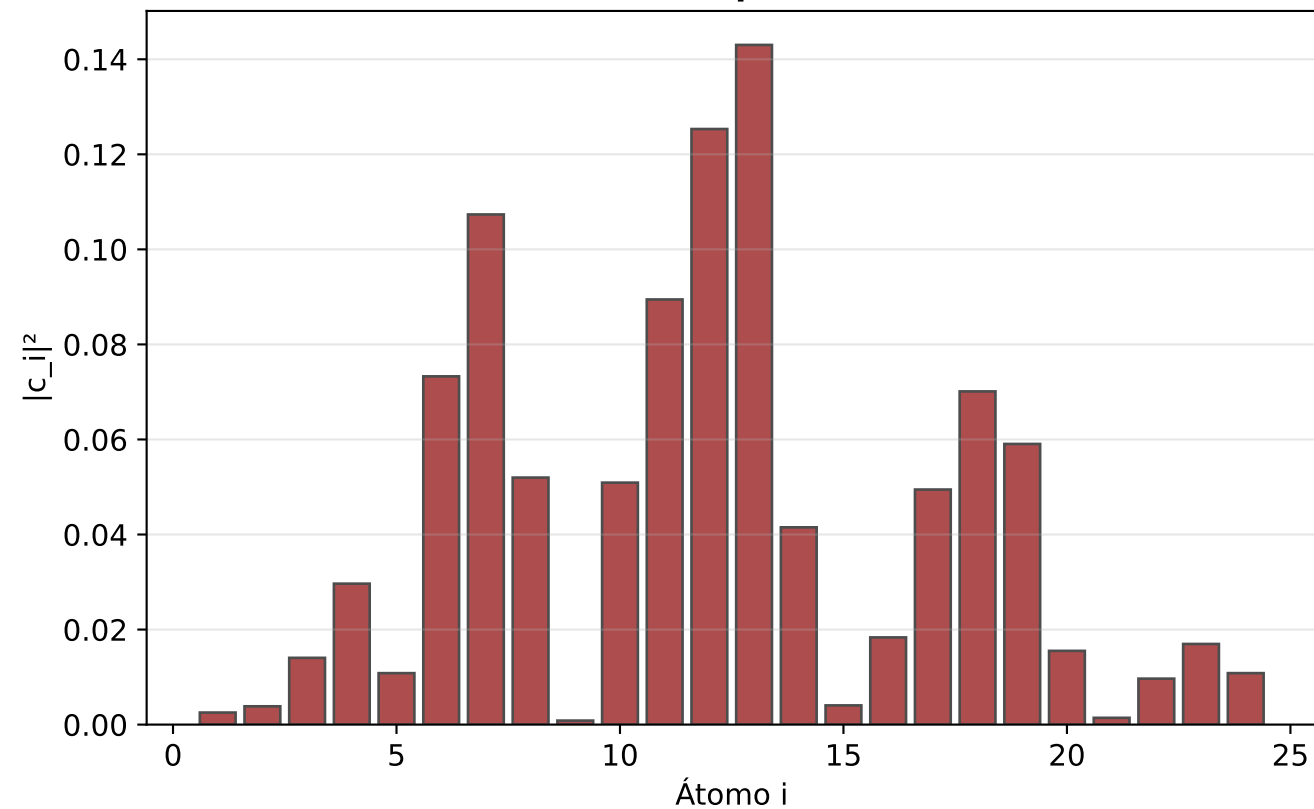


PIÑO DE GRAFENO - Funciones de Onda: $\psi = \sum c_i \phi_i$

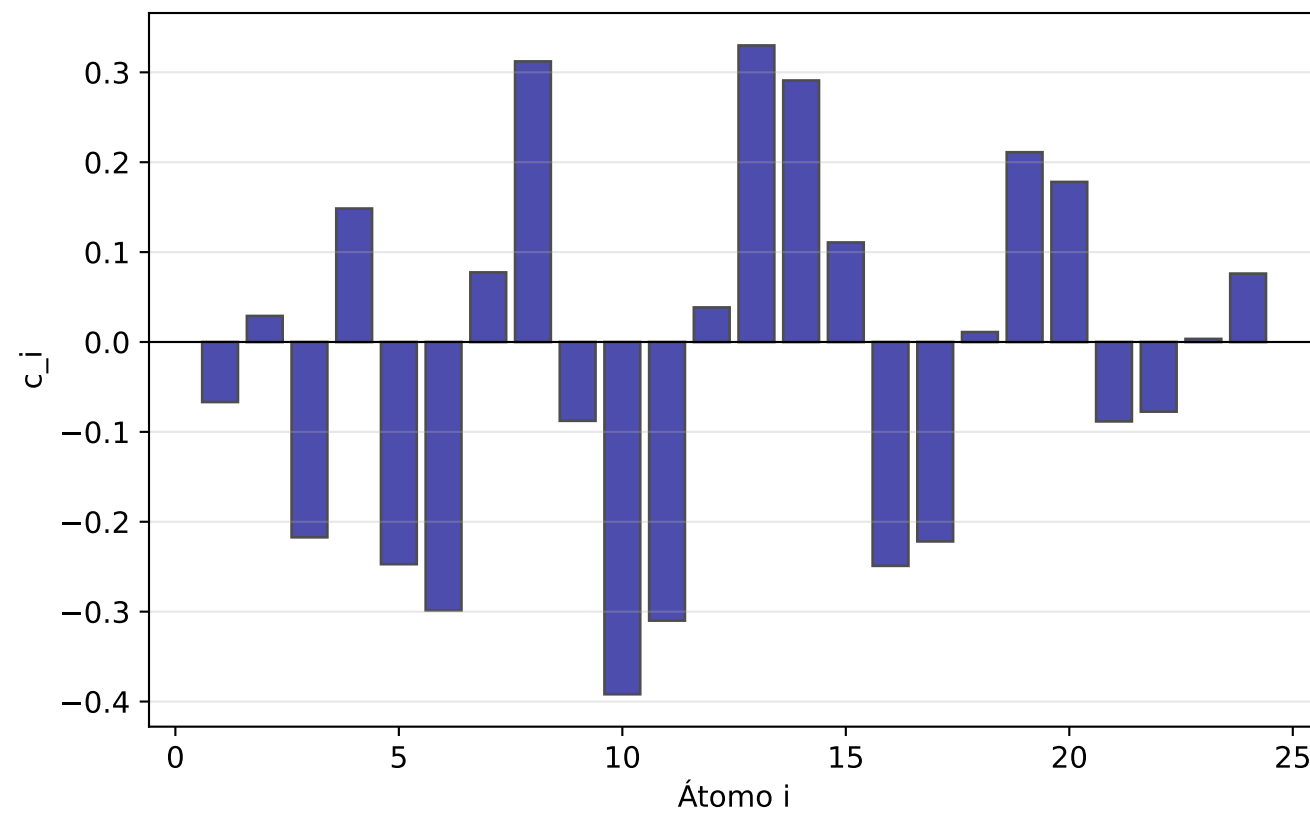
Estado Base ($E_0 = -3.587$)
Coeficientes de la función de onda



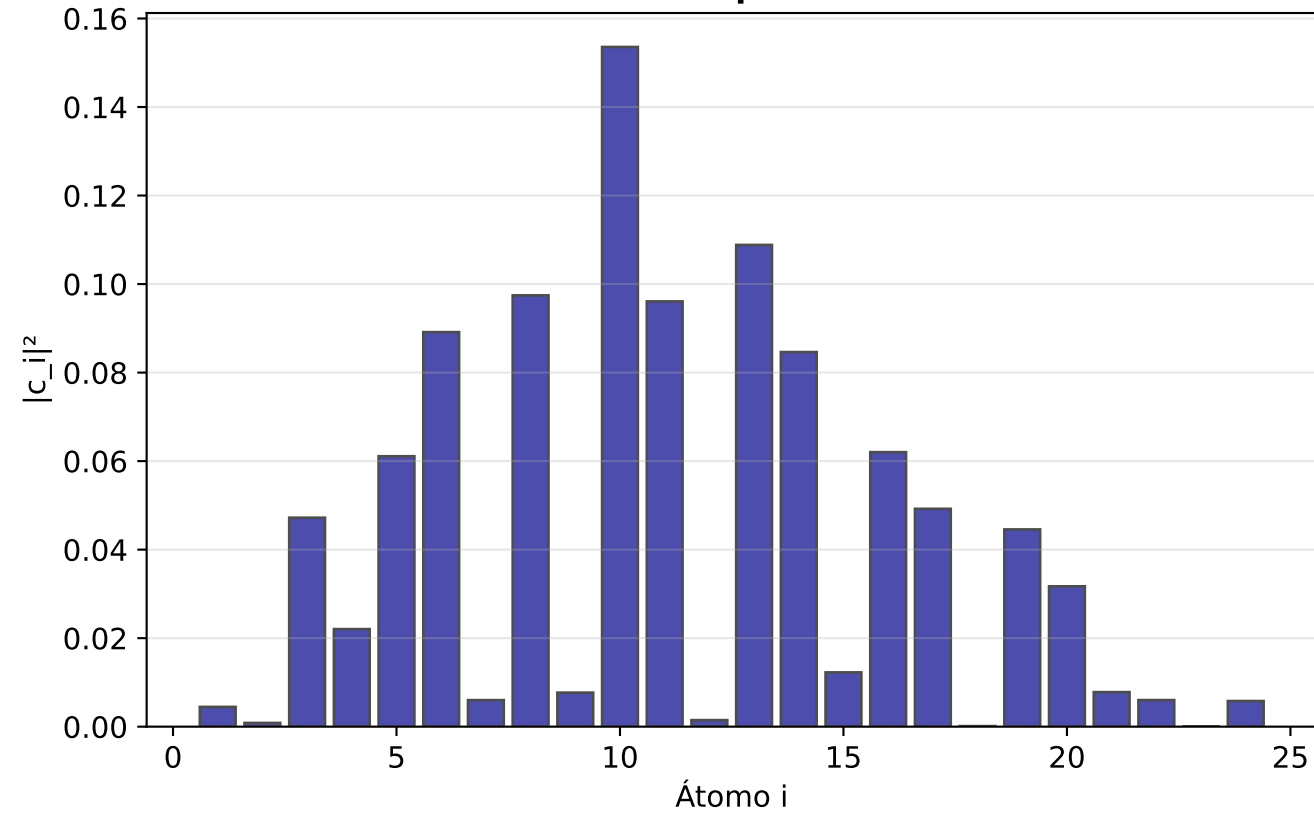
Estado Base ($E_0 = -3.587$)
Densidad de probabilidad



Primer Excitado ($E_1 = -2.819$)
Coeficientes de la función de onda

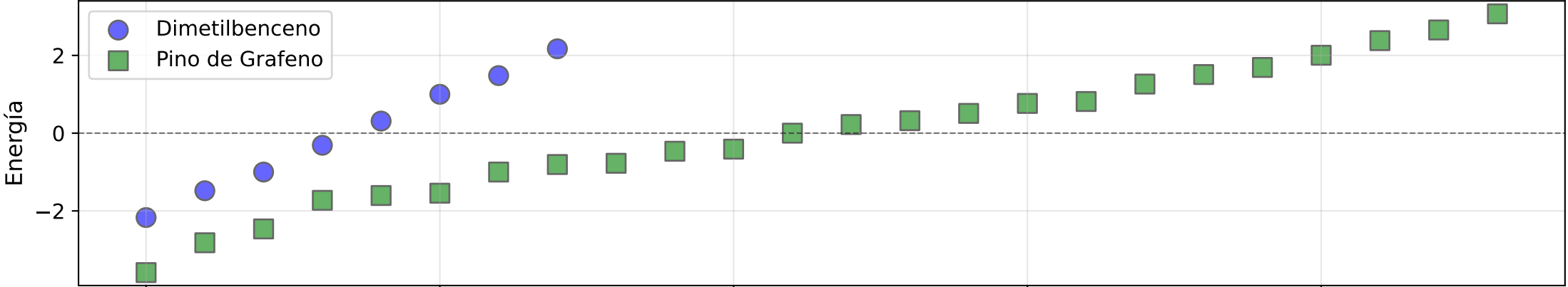


Primer Excitado ($E_1 = -2.819$)
Densidad de probabilidad



COMPARACIÓN ENTRE MOLÉCULAS

Comparación de Espectros de Energía



Propiedad	Dimetilbenceno	Pino de Grafeno
Número de átomos	8	24
E_0 (estado base)	-2.170086	-3.586617
E_1 (primer excitado)	-1.481194	-2.819141
Gap $\Delta E = E_1 - E_0$	0.688892	0.767476
Energía mínima	-2.170086	-3.586617
Energía máxima	2.170086	3.069720
Ancho de banda	4.340172	6.656337

Análisis Cualitativo

- Dimetilbenceno:
- Sistema pequeño (8 átomos) con espectro discreto bien definido
 - El estado base muestra distribución uniforme de probabilidad en el anillo
 - Gap de energía moderado: 0.689
 - Los grupos metilo contribuyen a la densidad electrónica

- Pino de Grafeno:
- Sistema grande (24 átomos) con espectro más denso
 - El estado base está deslocalizado sobre toda la estructura
 - Gap de energía pequeño: 0.767
 - Comportamiento más cercano al grafeno (semi-metálico)
 - Mayor ancho de banda indica mayor deslocalización electrónica