

Calculo de orbitales moleculares p en C_{60} mediante el método de Huckel

Raúl Santoy Flores, Alfredo Tlahuice Flores

*Universidad Autónoma de Nuevo León
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas*

19 de mayo de 2022

1. Resumen

En este trabajo se realizó un computo científico aproximado a cálculos de niveles de energía para los orbitales moleculares en el C_{60} , ilustrando primero la nube electrónica simple para cada átomo de carbono para después computando la paridad de en los orbitales p. Con base en el método de Huckel que modela de forma simple la teoría del orbital molecular. Se obtuvieron los estados de energía en la banda Homo-Lumo.

2. Introducción

El método de Huckel se basa en la teoría de los orbitales moleculares, propuesto por Erich Huckel en 1930, es una forma simple de calcular los orbitales moleculares como una combinación lineal de los orbitales atómicos. La teoría predice los orbitales p de los electrones (enlaces covalentes) para moléculas simples. El método tiene las siguientes características [2].

- Se limita en si mismo a hidrocarburos conjugados.
- Solo los electrones en los orbitales moleculares p son incluidos debido a que determinan las propiedades químicas y espectrales de estas moléculas.
- El método se basa sobre aplicar el método variacional a una combinación lineal de orbitales atómicos y haciendo suposiciones que simplifican con respecto a la superposición, resonancia y las integrales de Coulomb de estos orbitales atómicos. Tampoco es estrictamente la solución a las ecuaciones de Schrodinger.
- El método predice cuantos niveles de energía existen en términos de dos parámetros, llamados α , la energía del electrón en un orbital 2p, y β , la energía de interacción entre los orbitales 2p.
- Como adición el método también permite calcular la densidad de carga para cada átomo de los enlaces π , el orden de enlace fraccionario entre dos átomos cualesquiera y el momento dipolar resultante entre otros.

3. Cálculo de orbitales

Si bien el código fuente o los detalles computacionales no se mostraran en este contenido, se explica el diseño de estos resultados, comenzando por obtener las posiciones atómicas del C_{60} con base al icosaedro, después se realiza una optimización geométrica y se extraen las posiciones resultantes y en particular el archivo con formato `.pdb`, enseguida se calcula con el método de Huckel (`.f`) utilizando este archivo como entrada, entregando como salida los valores de cada nivel de energía y los coeficientes de contribución de carga de cada átomo en disposición.

3.1. Post-Proceso

Procesando estos valores, montamos una escena en POV-Ray en formato `.gif` la cuál tiene bloque fundamental, el siguiente bloque de código

```
#declare r = 5;
#declare ra = 0.15;
#declare pos = array[60];
#declare vec = <0,0,0>;
#declare i=0;
#declare c60 =
union{
#while (i<60)
  #read(Archivo, xx,yy,zz,ss)
  #declare pos[i] = <xx,yy,zz>;
  sphere{ pos[i], ra pigment{color rgb<1, 0.65, 0>} }

  #declare d = VDist(vec,pos[i]);
  #if (d < 1.46 & i > 0)
    cylinder{ vec, pos[i], ra texture{ pigment{ color White}
      finish { reflection 0.1 phong 1}}}
  #end
  #declare vec = pos[i];

  // Cyan = Carga Negativa
  // Magenta = Carga Posistiva
  #if (ss<0)
    #declare d = VDist(0, pos[i]);
    sphere { 1.2*pos[i], abs(r*ss) texture{pigment{color Cyan filter 0.5}
      finish{diffuse 0.9 phong 0.5}}}
    sphere { 0.8*pos[i], abs(r*ss) texture{pigment{color Magenta filter 0.5}
      finish{diffuse 0.9 phong 0.5}}}
  #else
    sphere { 1.2*pos[i], r*ss texture{pigment{color Cyan filter 0.8}
      finish{diffuse 0.9 phong 0.5}}}
    sphere { 0.8*pos[i], r*ss texture{pigment{color Magenta filter 0.8}
      finish{diffuse 0.9 phong 0.5}}}
  #end
  #declare i = i + 1;
#end
}
```

POV-Ray realiza un renderizado mediante un archivo externo de formato `.ini` el cuál contiene los siguientes comandos

```
Input_File_Name = "c60.pov"
Output_File_Name = "./pngs/.png"
Initial_Clock = 0
Final_Clock = 1
Initial_Frame = 1
Final_Frame = 20
```

```
Cyclic_Animation = on
```

```
Width = 500
```

```
Height = 500
```

Se requiere que en el archivo .pov se localice en el comando **camera** los identificadores **rotate** y **clock** al comienzo del archivo respectivamente.

```
camera {location <0,0,-12> look_at <0,0,0> rotate y*360*clock}
```

y en la parte final del archivo, debe localizarse la siguiente línea

```
object{c60 rotate z}
```

4. Resultados

Se obtiene una nube electrónica de los orbitales p moleculares de los niveles de energía alrededor de los orbitales Homo-Lumo, que en previo trabajo, se reportan.

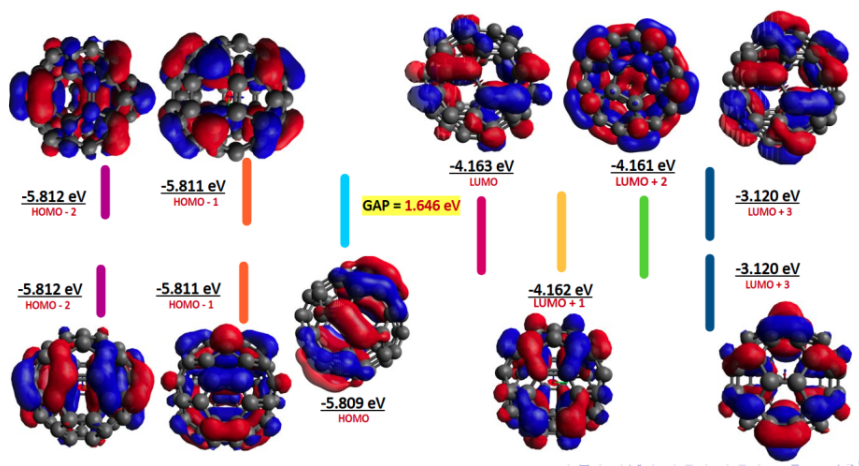


Figura 1: Orbitales moleculares del C_{60} en ORCA

En este .gif podemos comparar la morfología de estos orbitales según lo obtenido por cálculos de ORCA basado en la teoría DFT contra los obtenidos por el método de Huckel. En la figuras (2 y 3) se ilustra los orbitales Homo-Lumo, donde los orbitales de color cyan representan la carga negativa y los orbitales de color magenta representan la carga positiva.

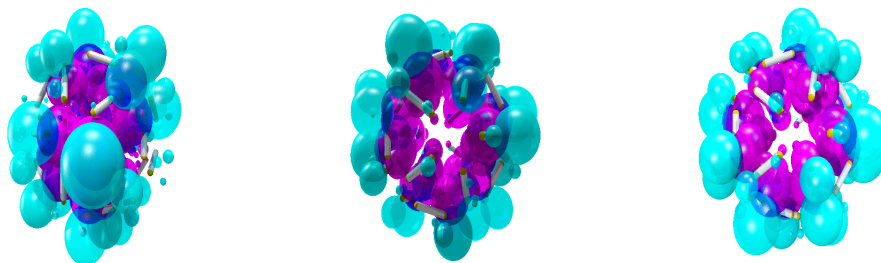


Figura 2: Orbitales p en nivel de energía Homo del C_{60}

Las energías obtenidas en estos niveles por el método de Huckel son para el Homo de $-1,55$ eV y Lumo de $0,35$ eV.

Si realizamos una tabla en lo experimentalmente ya reportado de los valores de energía en estos niveles Homo-Lumo [1], con ambos cálculos computacionales dados por ORCA y Huckel, podemos determinar lo apegado que están estos resultados.

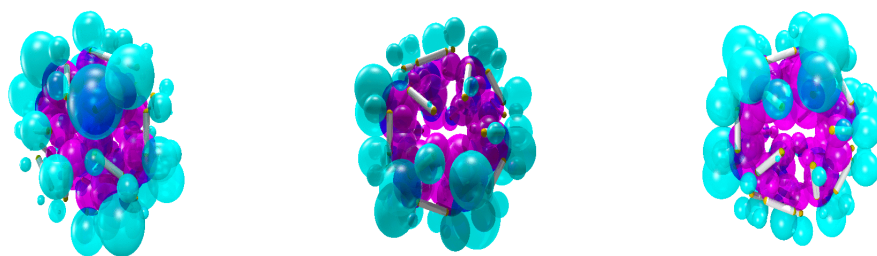


Figura 3: Orbitales p en nivel de energía Lumo del C₆₀

	Referencia [1]	ORCA	Huckel
Homo-Lumo (eV)	1.63 eV	1.646 eV	1.9 eV

Cuadro 1: Ancho energético de los orbitales Homo-Lumo del C₆₀ calculado mediante teoría DFT y método de Huckel

5. Conclusión

El método de Huckel sirve como una primera aproximación a conocer los orbitales moleculares de una molécula dada, aunque puede haber diferencias en los valores niveles energéticos, la tendencia en el ancho energético de los niveles Homo-Lumo es cercano con una diferencia de 0,27 eV. Podemos decir que no es la mejor aproximación pero es útil para conocer y visualizar de manera didáctica la posible morfología de los orbitales moleculares. Es satisfactorio renderizar un archivo gif a partir de comandos inscritos en POV-Ray, para los estudiantes y académicos otorga la facilidad de inspeccionar sitios específicos con cálculos mas rápidos contra el tiempo de calculo que le toma a ORCA.

Referencias

- [1] I. M. L. Billas, T. P. Martin, et. al. (1999). First principles calculations of Si doped fullerenes: Structural and electronic localization properties in C₅₉Si and C₅₈Si₂. J. Chem. Phys. 111, 6787 (1999); doi.org/10.1063/1.480018
- [2] Hückel method. Wikipedia (2022) https://en.wikipedia.org/wiki/H%C3%BCckel_method