

Tarea 8: Física Atómica y Materia Condensada

Tomás Ricardo Basile Álvarez
316617194

May 13, 2022

Ejercicio 1

Discutir la configuración electrónica y la estructura del enlace de las molécula NO . Comparar con la molécula N_2 . ¿Cuál de las dos moléculas es más estable?

Primero vamos a ver los orbitales atómicos de valencia de cada átomo del NO . Para el nitrógeno la configuración electrónica es $2s^2 2p^3$, por lo que tiene electrones de valencia en las capas $2s$ y $2p$. El oxígeno tiene configuración $2s^2 2p^4$, por lo que también tiene sus electrones de valencia en las capas $2s$ y $2p$. Entonces podemos ver cuáles son los orbitales moleculares σ y π posibles:

- σ : $O2s, N2s, O2p_z, N2p_z$. Darán lugar entonces a cuatro orbitales moleculares, que denotamos por $1\sigma, 2\sigma, 3\sigma, 4\sigma$
- π : $O2p_{xy}, N2p_{xy}$. Darán lugar entonces a dos orbitales moleculares doblemente degenerados, que denotamos por 1π y 2π .

Además, tenemos un total de 11 electrones de valencia para poner en estos orbitales (5 electrones de valencia del N y 6 del O). Para ver la forma en que se llenan estos orbitales moleculares es necesario hacer un diagrama de los niveles de estos, el cual se puede encontrar en la referencia [1] y es el siguiente:

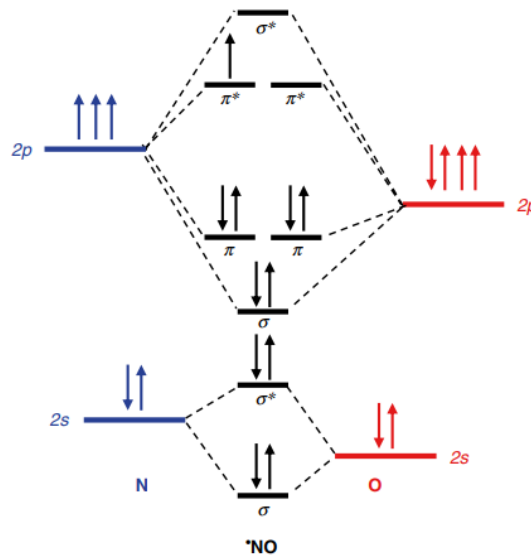


Figure 1: Diagrama orbital de NO . Obtenido de [1].

La forma en que se llenan estos orbitales moleculares de menor a mayor energía es entonces:

$$(1\sigma)^2(2\sigma^*)^2(3\sigma)^2(1\pi)^4(2\pi^*)^1$$

Comparamos ahora con la molécula N^2 , para esta molécula homonuclear ya obtuvimos la configuración en clase (ecuación 9.12 de las notas) y resultó ser que los 14 electrones (7 de cada nitrógeno, lo que incluye a los de capas interiores) se acomodan como:

$$(\sigma_g 1s)^2(\sigma_u^* 1s)^2(\sigma_g 2s)^2(\sigma_u^* 2s)^2(\pi_u 2p)^4(\sigma_g 2p)^2$$

Vemos que el nitrógeno tiene capas llenas para todos los orbitales ligantes $2p$ y no tiene ningún electrón en orbitales antiligantes $2p$, esto hace que la molécula esté muy ligada y sea muy estable.

Por otro lado, en la molécula de NO hay un electrón en una órbita π antiligante. Esto se puede entender en parte porque la molécula NO tiene un electrón de más comparada con N^2 (por el electrón adicional del oxígeno respecto al nitrógeno). Para este electrón adicional no queda más que ocupar una órbita antiligante. Por lo tanto, la energía con la que se mantiene el enlace del NO es menor a la de N^2 y es entonces una molécula menos estable.

Esto se puede confirmar también con los datos de la tabla 9.1 de las notas, en los que se muestra que la energía de disociación de NO es $5.3eV$, mientras que la de N_2 es $7.37eV$. Confirmando nuevamente que la molécula NO tiene un enlace menos fuerte que N_2 .

Ejercicio 2

2. Escribir las configuraciones electrónicas de las siguientes moléculas diatómicas heteronucleares. Determinar si las moléculas son polares y en caso afirmativo identificar cuál extremo de la molécula es positivo y cuál negativo.

a) LiH

Primero vemos los orbitales atómicos de valencia de cada átomo de la molécula. Para el hidrógeno la configuración electrónica es $1s^1$, por lo que se tiene solamente un electrón en capa $1s$. El litio tiene una configuración $1s^2 2s^1$. Por lo tanto, los orbitales moleculares son solamente de tipo σ y son los siguientes:

- σ : $Li1s, Li2s, H1s$. Darán lugar entonces a tres orbitales moleculares, que denotamos por $1\sigma, 2\sigma, 3\sigma$.

Además, tenemos un total de 4 electrones para poner en estos orbitales (3 del litio y 1 del hidrógeno). Estos electrones llenarán los primeros dos orbitales moleculares disponibles, por lo que la configuración será:

$$(1\sigma)^2(2\sigma)^2$$

Para determinar si la molécula es polar, podemos usar la afinidad electrónica de cada átomo. Como vimos en clase, si la diferencia entre las afinidades de ambos átomos es alta (hay un átomo con afinidad electrónica mayor al otro), se estará formando una molécula polar en la que el electrón tiene mayor presencia en el átomo con mayor afinidad, que por tanto es el extremo negativo de la molécula.

Según [2], la afinidad electrónica del litio es $0.618eV$ y la del hidrógeno es $0.754eV$. Las afinidades son comparables, por lo que como vimos en clase, se trata de un enlace covalente, en el que la parte negativa se alinea un poco más con el hidrógeno y la positiva con el litio.

b) CN

Empezamos viendo los orbitales atómicos de los electrones de valencia de cada uno de los átomos. El carbono tiene una configuración $2s^2 2p^2$, por lo que tiene tanto orbitales s como p . El nitrógeno tiene configuración $2s^2 2p^3$, por lo que también tiene tanto orbitales s como p . Por lo tanto, los orbitales moleculares son σ o π y pueden ser los siguientes:

- σ : $C2s, N2s, C2p_z, N2p_z$. Darán lugar entonces a cuatro orbitales moleculares: $1\sigma, 2\sigma, 3\sigma, 4\sigma$.
- π : $N3p_{x,y}, C3p_{x,y}$. Darán lugar entonces a dos orbitales moleculares: $1\pi, 2\pi$.

Además, tenemos un total de 9 electrones para poner en estos orbitales (4 del carbono y 5 del nitrógeno), por lo que la configuración base es:

$$(1\sigma)^2(2\sigma)^2(1\pi)^4(3\sigma)^1$$

Al igual que antes, para determinar si la molécula es polar, podemos usar la afinidad electrónica de cada átomo. Como vimos en clase, si la diferencia entre las afinidades de ambos átomos es alta (hay un átomo con afinidad electrónica mayor al otro), se estará formando una molécula polar en la que el electrón tiene mayor presencia en el átomo con mayor afinidad, que por tanto es el extremo negativo de la molécula.

Según [2], la afinidad electrónica del carbono es $1.262eV$ y la del nitrógeno es $-0.07eV$. Las afinidades son muy distintas, por lo que como vimos en clase, la partícula será polar, con su parte negativa en el carbono y la positiva en nitrógeno.

c) *SO*

Primero vemos los orbitales atómicos de valencia de cada átomo de la molécula. Para el azufre, la configuración electrónica es $3s^2 3p^4$, por lo que se tienen 6 electrones de valencia en orbitales s y p . El oxígeno tiene una configuración $2s^2 2p^4$, por lo que tiene 6 electrones en orbitales s y p . Por lo tanto, los orbitales moleculares son σ o π y pueden ser los siguientes:

- σ : $S3s, O2s, S3p_z, O2p_z$. Se tendrán cuatro orbitales moleculares, que denotamos por $1\sigma, 2\sigma, 3\sigma, 4\sigma$.
- π : $S3p_{x,y}, O2p_{x,y}$. Se tendrán dos orbitales moleculares, $1\pi, 2\pi$.

Además, tenemos un total de 12 electrones para poner en estos orbitales (6 del azufre y 6 del oxígeno). Estos electrones llenarán los orbitales moleculares disponibles, por lo que la configuración será:

$$(1\sigma)^2(2\sigma)^2(1\pi)^4(3\sigma)^2(4\sigma)^2$$

Según [2], la afinidad electrónica del azufre es 2.077eV y la del oxígeno es 1.461eV . La diferencia en afinidades es considerable, por lo que como vimos en clase, la partícula será polar, con su parte negativa en el azufre y la positiva en oxígeno.

d) *ClF*

Empezamos viendo los orbitales atómicos de los electrones de valencia de cada uno de los átomos. El cloro tiene una configuración $3s^2 3p^5$, por lo que tiene tanto orbitales s como p . El flúor tiene configuración $2s^2 2p^5$, por lo que también tiene tanto orbitales s como p . Por lo tanto, los orbitales moleculares son σ o π y pueden ser los siguientes:

- σ : $Cl2s, F2s, Cl2p_z, F2p_z$. Es decir, se tendrán cuatro orbitales moleculares: $1\sigma, 2\sigma, 3\sigma, 4\sigma$.
- π : $F3p_{x,y}, Cl3p_{x,y}$. Es decir, tendremos dos orbitales moleculares: $1\pi, 2\pi$.

Además, tenemos un total de 14 electrones para poner en estos orbitales (7 del cloro y 7 del flúor) y hay un total de 16 posibles lugares para ellos en los orbitales $1\sigma, 2\sigma, 3\sigma, 4\sigma, 1\pi, 2\pi$. Tiene sentido esperar que se llenarán todos los orbitales posibles dejando vacío solamente el que tenga mayor energía, por lo que la configuración es:

$$(1\sigma)^2(2\sigma)^2(1\pi)^4(3\sigma)^2(2\pi)^4$$

Según [2], la afinidad electrónica del cloro es 3.612eV y la del flúor es 3.401eV . La diferencia en afinidades es muy pequeña, por lo que como vimos en clase, la partícula no será demasiado polar.

e) *HI*

Empezamos viendo los orbitales atómicos de los electrones de valencia de cada uno de los átomos. El hidrógeno tiene una configuración $1s^1$, por lo que tiene sólo orbital s . El yodo tiene configuración $5s^2 5p^5$, por lo que también tiene tanto orbitales s como p . Por lo tanto, los orbitales moleculares son σ o π y pueden ser los siguientes:

- σ : $Is, I5s, Ip_z$. Es decir, se tendrán tres orbitales moleculares: $1\sigma, 2\sigma, 3\sigma$.
- π : $I5p_{x,y}$. Es decir, un orbital molecular: 1π .

Además, tenemos un total de 8 electrones para poner en estos orbitales (1 del hidrógeno y 7 del yodo) y los orbitales $1\sigma, 2\sigma, 3\sigma, 1\pi$ tienen lugar para un total de 10 electrones. Los orbitales se llenarán excepto por el más energético, entonces la configuración es:

$$(1\sigma)^2(2\sigma)^2(1\pi)^4$$

Según [2], la afinidad electrónica del hidrógeno es 0.754eV y la del yodo es 3.059eV . La diferencia en afinidades es considerable, por lo que como vimos en clase, la partícula será polar, con la parte negativa en el yodo y la positiva en el hidrógeno.

Ejercicio 3

Demostrar que la razón del número de moléculas diatómicas en un estado rotacional excitado J al número de moléculas en el estado rotacional base $J = 0$ en un gas a temperatura T está dado por

$$\frac{N_J}{N_0} = (2J + 1) \exp \left[-\frac{\hbar^2 J(J + 1)}{2\mu R_e^2 k_B T} \right]$$

donde μ es la masa reducida, R_e es la distancia de equilibrio y k_B es la constante de Boltzmann. ¿Para qué valor de J se tiene el máximo de población? Hacer una gráfica de esta expresión para $H^{35}Cl$ a temperatura ambiente (300K) en función de J

Sabemos que la energía rotacional de una molécula diatómica está dada por (ecuación 8.47 de las notas):

$$E_J = \frac{\hbar^2 J(J + 1)}{2\mu R_e^2}$$

Por otro lado, según la distribución de Boltzmann, la probabilidad de que una partícula a temperatura T se encuentre en un estado con energía E_J es $p_J = g_J e^{-E_J/k_B T} / Z$, donde Z es la función de partición y g_J es la degeneración de la energía E_J . La cantidad de proyecciones con cierto valor de J es $2J + 1$, por lo que la degeneración es $g_J = 2J + 1$. Por lo tanto, la probabilidad de encontrar una partícula en un estado con energía E_J es $p_J = g_J e^{-E_J/k_B T} / Z = (2J + 1) e^{-E_J/k_B T} / Z$.

Por lo tanto, la razón entre la probabilidad de que una partícula tenga un valor de espín J o un valor $J = 0$ es:

$$\frac{p_J}{p_0} = \frac{(2J + 1) e^{-E_J/k_B T} / Z}{(2(0) + 1) e^{-E_0/k_B T} / Z} = (2J + 1) e^{(E_0 - E_J)/k_B T}$$

Esta razón de probabilidades es igual a la razón entre la cantidad de partículas en el estado excitado N_J y la cantidad en el estado base N_0 :

$$\frac{N_J}{N_0} = (2J + 1) e^{(E_0 - E_J)/k_B T}$$

Sustituimos la expresión de $E_J = \frac{\hbar^2 J(J + 1)}{2\mu R_e^2}$ y de $E_0 = \frac{\hbar^2 (0)(0 + 1)}{2\mu R_e^2} = 0$ y nos queda:

$$\begin{aligned} \frac{N_J}{N_0} &= (2J + 1) \exp \left[\left(0 - \frac{\hbar^2 J(J + 1)}{2\mu R_e^2} \right) / k_B T \right] \\ &= \boxed{(2J + 1) \exp \left[-\frac{\hbar^2 J(J + 1)}{2\mu R_e^2 k_B T} \right]} \end{aligned}$$

¿Para qué valor de J se tiene el máximo de población?

Como demostramos antes, la población del estado J es:

$$N_J = N_0 (2J + 1) \exp \left[-\frac{\hbar^2 J(J + 1)}{2\mu R_e^2 k_B T} \right]$$

Por lo tanto, para maximizar esta cantidad, hay que maximizar $(2J + 1) \exp \left[-\frac{\hbar^2 J(J + 1)}{2\mu R_e^2 k_B T} \right]$ (que escribiremos mejor como $(2J + 1) \exp(-\beta J(J + 1))$ con $\beta = \hbar^2 / 2\mu R_e^2 k_B T$). Este máximo se puede conseguir derivando

la expresión respecto a J e igualando a 0. La derivada de la expresión se consigue directamente y es:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dJ}(2J+1)\exp[-\beta J(J+1)] \\
&= \frac{d}{dJ}(2J+1)\exp[-\beta J^2 - \beta J] \\
&= 2\exp[-\beta J^2 - \beta J] + (2J+1)(-2\beta J - \beta)\exp[-\beta J^2 - \beta J] \\
&= [2 + (2J+1)\beta(-2J-1)]\exp[-\beta(J^2 + J)]
\end{aligned}$$

El máximo se encontrará cuando esta derivada valga 0. Como la exponencial siempre es distinta de 0, el término entre corchetes tiene que anularse, lo que nos lleva a:

$$\begin{aligned}
& 2 + \beta(2J_{max} + 1)(-2J_{max} - 1) = 0 \\
\Rightarrow & 2 + \beta(-4J_{max}^2 - 4J_{max} - 1) = 0 \\
\Rightarrow & -4\beta J_{max}^2 - 4\beta J_{max} - \beta + 2 = 0
\end{aligned}$$

Podemos resolver esta ecuación con la fórmula general para ecuaciones de segundo grado:

$$\begin{aligned}
J_{max} &= \frac{4\beta \pm \sqrt{16\beta^2 + 16\beta(2-\beta)}}{-8\beta} \\
&= \frac{4\beta \pm \sqrt{32\beta}}{-8\beta} \\
&= -\frac{1}{2} \mp \frac{1}{\sqrt{2\beta}}
\end{aligned}$$

Como físicamente J es un número positivo, nos quedamos con la única solución que puede ser positiva (tomando el signo $+$ en la expresión) y tenemos que:

$$\begin{aligned}
J_{max} &= -\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{2\beta}} \\
&= -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{\mu R_e^2 k_B T}{\hbar^2}} \\
&= \boxed{-\frac{1}{2} + \frac{R_e}{\hbar} \sqrt{\mu k_B T}}
\end{aligned}$$

Hacer una gráfica de esta expresión para $H^{35}Cl$ a temperatura ambiente ($300K$) en función de J .

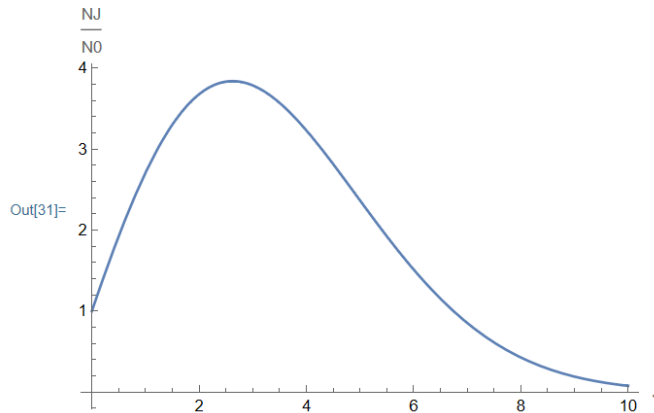
Simplemente hacemos la gráfica de $(2J+1)\exp\left[-\frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R_e^2 k_B T}\right]$ para los datos dados. Lo único que hace falta es calcular la masa reducida μ y la distancia de equilibrio R_e .

Según [3], la distancia de equilibrio de esta molécula es $127.4pm = 127.4 \times 10^{-12}m$. La masa reducida se define como $\frac{m_H m_{Cl}}{m_H + m_{Cl}} = \frac{(1u)(35u)}{1u + 35u} = \frac{35}{36}u = 1.6144 \times 10^{-27}kg$. Con esto ya tenemos todas las constantes necesarias para graficar la función en $T = 300K$. En la siguiente imagen se muestra el comando de Mathematica para graficar esta función y la gráfica resultante.

```

In[26]:= T = 300;
hbar = 6.62607 * 10^(-34) / (2 * Pi);
re = 127.4 * 10^(-12);
kb = 1.380649 * 10^(-23);
mu = 1.6144 * 10^(-27);
Plot[(2 * J + 1) * Exp[-hbar^2 * J * (J + 1) / (2 * mu * re^2 * kb * T)],
{J, 0, 10}, AxesLabel -> {HoldForm[J], HoldForm[NJ/N0]}]

```



Vemos que la curva vale 1 en $J = 0$ (lo cual es de esperar porque estamos graficando N_J/N_0) y que crece hasta encontrar un máximo alrededor de $J = 2.5$, donde $N_J/N_0 \simeq 3.8$ y luego decrece y tiende a 0 conforme crece J .

Podemos incluso comprobar que lo calculado anteriormente sobre que el valor de J en el que se alcanza el máximo es $J_{max} = -\frac{1}{2} + \frac{R_e}{\hbar} \sqrt{\mu k_B T}$. Si calculamos este valor para los datos dados, obtenemos:

```

In[33]:= -1 / 2 + re / hbar * Sqrt[mu * kb * T]

```

```

Out[33]:= 2.62393

```

Este resultado de $J_{max} = 2.62393$ coincide con la gráfica.

Ejercicio 4

Demostrar que la función de onda

$$\psi = N(\phi_s + \alpha\phi_{p_x} + \beta\phi_{p_y} + \gamma\phi_{p_z})$$

tiene un máximo en la dirección del vector $\vec{a} = \alpha\hat{i} + \beta\hat{j} + \gamma\hat{k}$ y su mínimo en la dirección opuesta. En consecuencia el ángulo entre los máximos de dos funciones de onda híbridas correspondientes a los vectores \vec{a} y \vec{b} es igual al ángulo entre esos vectores. Escribir el vector \vec{a} para cada una de las funciones híbridas sp^3 :

$$\psi_1 = N(\phi_s + \phi_{p_x} + \phi_{p_y} + \phi_{p_z})$$

$$\psi_2 = N(\phi_s + \phi_{p_x} - \phi_{p_y} - \phi_{p_z})$$

$$\psi_3 = N(\phi_s - \phi_{p_x} + \phi_{p_y} - \phi_{p_z})$$

$$\psi_4 = N(\phi_s - \phi_{p_x} - \phi_{p_y} + \phi_{p_z})$$

Demostrar que estos vectores apuntan en dirección de los vértices de un tetraedro regular formando entre sí ángulos de $109^\circ 28'$

Para empezar, sabemos que los orbitales s son esféricamente simétricos, por lo que para encontrar la dirección que maximiza ψ no hace falta considerar la parte que depende de ϕ_s ya que ésta no depende de la dirección. Por lo tanto, buscamos maximizar solamente el resto de la expresión de ψ , que es $\alpha\phi_{p_x} + \beta\phi_{p_y} + \gamma\phi_{p_z}$.

En clase vimos que los orbitales dirigidos p_x, p_y, p_z se definen de tal manera que $rp_x \propto x$, $rp_y \propto y$, $rp_z \propto z$, por lo que lo que $p_x \propto x/r$, $p_y \propto y/r$, $p_z \propto z/r$. Entonces, buscamos maximizar $\alpha\phi_{p_x} + \beta\phi_{p_y} + \gamma\phi_{p_z}$, que es proporcional a $\frac{1}{r}(\alpha x + \beta y + \gamma z)$.

Como r no depende de la dirección, encontrar la dirección que maximiza esta cantidad es equivalente a maximizar lo que se encuentra entre paréntesis. Por lo tanto, buscamos la dirección (x, y, z) que maximiza a $\alpha x + \beta y + \gamma z$.

Esto es fácil de hacer porque podemos notar que $\alpha x + \beta y + \gamma z$ es igual al producto punto entre (α, β, γ) y (x, y, z) . Entonces, la dirección (x, y, z) que maximiza esta cantidad es la de (α, β, γ) (porque un producto punto entre vectores es máximo cuando son paralelos). Similarmente, la dirección que minimiza a $\alpha x + \beta y + \gamma z$ es $(-\alpha, -\beta, -\gamma)$ (porque el producto punto es mínimo cuando los vectores son anti paralelos). Con esto hemos probado lo primero que se nos pide.

El vector \vec{a} para cada una de las funciones híbridas se puede escribir directamente usando que se define como $\vec{a} = (\alpha, \beta, \gamma)$ donde $\psi = N(\psi_s + \alpha\psi_{p_x} + \beta\psi_{p_y} + \gamma\psi_{p_z})$, por lo tanto, los vectores son:

$$\psi_1 = N(\phi_s + \phi_{p_x} + \phi_{p_y} + \phi_{p_z}) \Rightarrow \vec{a}_1 = (1, 1, 1)$$

$$\psi_2 = N(\phi_s + \phi_{p_x} - \phi_{p_y} - \phi_{p_z}) \Rightarrow \vec{a}_2 = (1, -1, -1)$$

$$\psi_3 = N(\phi_s - \phi_{p_x} + \phi_{p_y} - \phi_{p_z}) \Rightarrow \vec{a}_3 = (-1, 1, -1)$$

$$\psi_4 = N(\phi_s - \phi_{p_x} - \phi_{p_y} + \phi_{p_z}) \Rightarrow \vec{a}_4 = (-1, -1, 1)$$

Ahora vemos que estos vectores apuntan en las direcciones de un tetraedro regular. Para ello necesitamos ver que cualquier pareja de estos vértices forma un ángulo de $109^\circ 28'$. Comprobamos esto calculando el ángulo entre cada una de las parejas de vectores, lo cual se puede hacer usando que para vectores \vec{v}, \vec{w} que forman un ángulo θ , se cumple que $\vec{v} \cdot \vec{w} = |\vec{v}||\vec{w}|\cos\theta$, por lo que $\theta = \arccos\left(\frac{\vec{v} \cdot \vec{w}}{|\vec{v}||\vec{w}|}\right)$.

- \vec{a}_1 y \vec{a}_2 : En este caso el ángulo es:

$$\theta_{1,2} = \arccos\left(\frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2}{|\vec{a}_1||\vec{a}_2|}\right) = \arccos\left(\frac{(1, 1, 1) \cdot (1, -1, -1)}{|(1, 1, 1)|| (1, -1, -1)|}\right) = \arccos\left(\frac{-1}{\sqrt{3}\sqrt{3}}\right) = \arccos\left(\frac{-1}{3}\right) = 109^\circ 28'$$

- \vec{a}_1 y \vec{a}_3 : En este caso el ángulo es:

$$\theta_{1,3} = \arccos \left(\frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_3}{|\vec{a}_1||\vec{a}_3|} \right) = \arccos \left(\frac{(1, 1, 1) \cdot (-1, 1, -1)}{|(1, 1, 1)||(-1, 1, -1)|} \right) = \arccos \left(\frac{-1}{\sqrt{3}\sqrt{3}} \right) = \arccos \left(\frac{-1}{3} \right) = 109^\circ 28'$$

- \vec{a}_1 y \vec{a}_4 : En este caso el ángulo es:

$$\theta_{1,4} = \arccos \left(\frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_4}{|\vec{a}_1||\vec{a}_4|} \right) = \arccos \left(\frac{(1, 1, 1) \cdot (-1, -1, 1)}{|(1, 1, 1)||(-1, -1, 1)|} \right) = \arccos \left(\frac{-1}{\sqrt{3}\sqrt{3}} \right) = \arccos \left(\frac{-1}{3} \right) = 109^\circ 28'$$

- \vec{a}_2 y \vec{a}_3 : En este caso el ángulo es:

$$\theta_{2,3} = \arccos \left(\frac{\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3}{|\vec{a}_2||\vec{a}_3|} \right) = \arccos \left(\frac{(1, -1, -1) \cdot (-1, 1, -1)}{|(1, -1, -1)||(-1, 1, -1)|} \right) = \arccos \left(\frac{-1}{\sqrt{3}\sqrt{3}} \right) = \arccos \left(\frac{-1}{3} \right) = 109^\circ 28'$$

- \vec{a}_2 y \vec{a}_4 : En este caso el ángulo es:

$$\theta_{2,4} = \arccos \left(\frac{\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_4}{|\vec{a}_2||\vec{a}_4|} \right) = \arccos \left(\frac{(1, -1, -1) \cdot (-1, -1, 1)}{|(1, -1, -1)||(-1, -1, 1)|} \right) = \arccos \left(\frac{-1}{\sqrt{3}\sqrt{3}} \right) = \arccos \left(\frac{-1}{3} \right) = 109^\circ 28'$$

- \vec{a}_3 y \vec{a}_4 : En este caso el ángulo es:

$$\theta_{3,4} = \arccos \left(\frac{\vec{a}_3 \cdot \vec{a}_4}{|\vec{a}_3||\vec{a}_4|} \right) = \arccos \left(\frac{(-1, 1, -1) \cdot (-1, -1, 1)}{|(-1, 1, -1)||(-1, -1, 1)|} \right) = \arccos \left(\frac{-1}{\sqrt{3}\sqrt{3}} \right) = \arccos \left(\frac{-1}{3} \right) = 109^\circ 28'$$

Con esto probamos que el ángulo entre cualquier pareja de los vectores es el mismo y tiene un valor de $109^\circ 28'$, lo que demuestra que se trata de direcciones que definen a un tetraedro.

Referencias

- [1] Maia, Luisa y Moura, José. (2016). Detection of Nitric Oxide by Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy: Spin-Trapping with Iron-Dithiocarbamates. *Methods in Molecular Biology*. 1424. 81-102.
- [2] “Electron Affinity (Data Page).” Wikipedia, Wikimedia Foundation, 25 Jan. 2022, [https://en.wikipedia.org/wiki/Electron_affinity_\(data_page\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Electron_affinity_(data_page)).
- [3] “Hydrogen Chloride.” Wikipedia, Wikimedia Foundation, 14 Apr. 2022, https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen_chloride.