

45



**UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA DE MEXICO**

FACULTAD DE QUIMICA

**Módulo de apoyo para la Enseñanza de Teoría
de Orbitales Moleculares Asistido por
Computadora**

T E S I S :

**Que para Obtener el Grado de
INGENIERO QUIMICO**

Presenta:

Carlos Gutiérrez Jáyme

México, D. F.

1994

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Jurado asignado

Presidente	Prof. Caritino Moreno Padilla
Vocal	Prof. Hugo Torrens Miquel
Secretario	Prof. Sigfrido Escalante Tovar
1er. suplente	Prof. Luis Alberto Vicente Hinestroza
2do. suplente	Prof. Plinio Jesús Sosa Fernández

Sitio donde se desarrolló el tema

Departamento de Química Inorgánica
División de Estudios de Posgrado
Facultad de Química
Universidad Nacional Autónoma de México

Asesor del tema



M en C Sigfrido Escalante Tovar

Sustentante



Carlos Gutiérrez Jáymez

CONTENIDO

	página
Introducción.....	1
Antecedentes.....	3
Descripción del módulo.....	8
Resultados y discusión.....	15
Conclusiones.....	17
Referencias.....	18
Apéndice.	

INTRODUCCION.

Es sabido que el éxito en el aprendizaje de una persona radica en el método de enseñanza que ha recibido. La claridad en la explicación de algún concepto es fundamental, y solo el maestro habrá enseñado cuando el discípulo tenga en su mente el concepto impartido con la misma claridad que el maestro lo tiene. Muchos son los factores que influyen para que la premisa anterior no se cumpla y entre estos factores se encuentra la falta de herramientas de apoyo a la enseñanza, como pudieran ser gráficas, dibujos, fotografías ó paquetes de cómputo

El objetivo principal de este trabajo, es proveer a los alumnos de un instrumento adicional de apoyo que logre lo que no se logró en un salón de clases: aprender con claridad, tener el conocimiento en la mente sin dudas, aprender conceptos nuevos que no pudieron ser vistos en un salón de clases, o en el mejor de los casos, reafirmar lo que se ha aprendido.

En la Facultad de Química, la teoría de orbitales moleculares, se imparte a nivel licenciatura, en las asignaturas de estructura de la materia, química orgánica y química inorgánica. En estas dos últimas asignaturas, se toca el tema de teoría de orbitales moleculares, muy someramente, utilizando esta teoría para explicar barreras rotacionales y propiedades ácidas en algunos compuestos orgánicos, o bien para explicar las propiedades magnéticas de algunas moléculas como el oxígeno, el nitrógeno y algunos complejos, principalmente. Por lo que toca a la asignatura de estructura de la materia, la teoría de orbitales moleculares sólo es utilizada para explicar los diagramas de interacción de moléculas muy sencillas, como la molécula de hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, ya que resulta muy difícil poder desplegar e interpretar en un pizarrón un diagrama de interacción para moléculas más complejas. Debido a lo anterior, queda la impresión en los alumnos que la teoría de orbitales moleculares solo abarca moléculas muy sencillas, lo cual es falso.

Considerando el poco aprovechamiento que se hace de la teoría de orbitales moleculares en las asignaturas previamente mencionadas, debido en muchos casos a la falta de herramientas de apoyo para su enseñanza, creemos que es necesario proveer a los profesores de un instrumento adicional en el cual sea posible atacar muchos de los

conceptos que se pueden explicar a través de esta teoría y que resultan inabordables para ser tratados en una clase de cualquiera de las asignaturas mencionadas debido a la complejidad matemática y al tiempo que se requiere para hacer estos cálculos. Con un método de cálculo que utilice los principios de la teoría de orbitales moleculares dentro de un paquete de cómputo, que realice los cálculos por nosotros y que requiera muy poco tiempo de procesador, se conseguirá acercar más a los alumnos a los problemas reales de la química, además de que se aprovechará mucho más esta teoría para la explicación de muchos conceptos en el área de química orgánica e inorgánica.

Este trabajo como el título lo dice, es un módulo de apoyo para la enseñanza de la teoría de orbitales moleculares para ser operado a través del manejo de una computadora personal, en la cual se hallan una variedad de herramientas de apoyo a la enseñanza que hacen posible la ilustración de ejemplos que anteriormente eran inabordables. Está construido con ejemplos seleccionados que ilustran conceptos fundamentales en teoría atómica, orbitales moleculares, química orgánica y química inorgánica, de manera que puede ser explotado por alumnos de licenciatura que estén cursando asignaturas relacionadas con los temas tratados. Gracias a la forma en que se construyó este módulo, los usuarios del mismo, necesitan solo los más primordiales conocimientos de computación, de manera que su manejo no requiere del conocimiento de ningún programa de cómputo.

Este módulo le permite al alumno plantearse sus propias preguntas y buscar las respuestas mediante la interacción que tenga con el paquete de cómputo seleccionado.

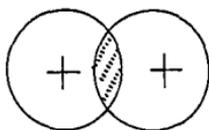
Además, este módulo cuenta con una guía que, orienta al usuario en el manejo del mismo, explica los objetivos educacionales de los ejemplos, provee de recomendaciones operativas encaminadas a explotar al máximo la información disponible, y cuenta con preguntas enfocadas a tocar conceptos que se pueden explicar a través de los ejemplos.

ANTECEDENTES.

La teoría del octeto de Lewis y la teoría de repulsión de pares electrónicos de capa de valencia predicen la naturaleza del enlace y las estructuras de las moléculas de compuestos con elementos que no son los de transición, sin embargo, estas teorías tienen serias limitaciones, en el tratamiento de muchos aspectos. Con la teoría de orbitales moleculares, la mayoría de los fenómenos de estructura y enlace, se pueden explicar, además, esta teoría considera a todos los compuestos químicos, aún los que están conformados por elementos de transición. Asimismo, la teoría de orbitales moleculares, ha sido exitosamente usada para predecir diversos fenómenos como potenciales de ionización, momentos dipolares, reactividad química de muchos tipos, geometría de las moléculas y otras numerosas propiedades.

Originalmente, la teoría de orbitales moleculares desarrollada por Mulliken, fue un intento de extender el modelo de orbital de Schrodinger en átomos a moléculas, para explicar el enlace y las propiedades químicas de la molécula.

La premisa básica bajo la cual se rige la teoría de orbitales moleculares, es que se forman orbitales moleculares a partir de orbitales atómicos de los átomos que conforman la molécula. Por ejemplo, para la combinación de dos orbitales atómicos 1s de dos átomos de hidrógeno se tiene:



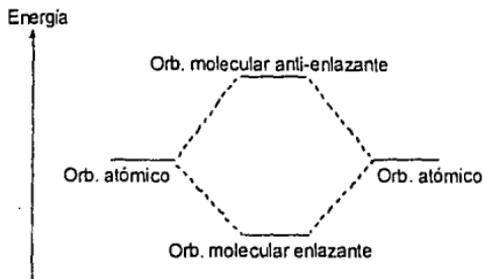
Orbital molecular enlazante



Orbital molecular antienlazante

Estos orbitales atómicos generan dos orbitales moleculares: uno de enlace y otro de anti-enlace. En el orbital molecular de enlace se tiene una zona de densidad electrónica entre los núcleos de los átomos, con lo que la repulsión electrónica entre los mismos es menor, resultando de esto que la energía del orbital de enlace es menor que la del anti-enlace, ya

que este último cuenta con un plano nodal entre los núcleos, con lo que la repulsión eléctrica es mayor.



Esos orbitales, como se ve en el anterior diagrama, tienen asignado un valor de energía y determinadas características espaciales. Toda la estructura electrónica de la molécula puede ser determinada, a partir de la determinación de los valores de energía y de las características espaciales de los orbitales, considerando la ocupación de los electrones en dichos orbitales. Esta ocupación de los orbitales, sigue el principio, al igual que en los orbitales atómicos, que indica que el llenado de los orbitales empieza con los de más bajo nivel de energía, hasta los de más alto. El conocimiento de la estructura electrónica de una molécula, ayuda a conocer el comportamiento químico de la misma.

Todos los métodos matemáticos de cálculo que han sido desarrollados conforme a la teoría de orbitales moleculares, tratan de explicar con distintos niveles de aproximación los cuestionamientos químicos de la realidad. Sin embargo, aún con las poderosas herramientas computacionales, resulta imposible resolver de manera exacta: la ecuación de Schrodinger, para sistemas que contengan más de un electrón. De esta manera en los actuales métodos de cálculo, el grado de aproximación a la realidad depende de las consideraciones y suposiciones que se hayan realizado para ahorrar tiempo y dinero, y con esto facilitar el cálculo. Considerando lo anterior y debido a que el motivo del uso de esta teoría, en nuestro caso está encaminado a fines didácticos, decidimos escoger un método de aproximación que proporcionara resultados rápidos, donde principalmente se observaran aspectos de manera cualitativa, como relaciones estructura-estabilidad, forma

de los orbitales, interacciones HOMO-LUMO, barreras rotacionales, etc., o bien, se tocaran conceptos que involucraran valores numéricos, los cuales serían interpretados únicamente para ser comparados entre ellos, o bien para correlacionarlos y explicar tendencias.

La teoría de Huckel extendido desarrollada por Hoffmann¹ posee las características descritas anteriormente, es decir, sacrifica la precisión, para proporcionar cálculos rápidos que no exigen una gran demanda de cómputo, con lo que se pueden analizar aspectos cualitativos, tendencias en el comportamiento químico y valores desde un punto de vista comparativo.

El principal objetivo de estos métodos aproximados es encontrar las funciones de onda ψ , las cuales representan la solución de la ecuación de Schrodinger:

$$H\psi = E\psi$$

en la cual H es el operador hamiltoniano, el cual incluye todos los términos de interacción entre los electrones y el núcleo, y E es el valor de la energía.

En la teoría de Huckel, se considera a la función de onda constituida como el producto de dos funciones de onda: una que considera electrones de tipo sigma y otra que considera los electrones de tipo pi:

$$\psi = \psi_{\sigma} * \psi_{\pi}$$

y solamente realiza el cálculo para los electrones de tipo pi, no tomando en cuenta los electrones de tipo sigma. Con esta aproximación, es obvio que el cálculo queda restringido para moléculas que tengan principalmente electrones de tipo pi, por lo que el cálculo para muchas moléculas, sobre todo inorgánicas, no sería confiable ya que no representaría lo que sucede en la realidad.

Para la teoría de Huckel extendido se consideró a la función de onda formada por dos funciones de onda, una que consideraba los electrones de coraza y otra que consideraba los electrones de la capa de valencia, y con esta última función de onda realizaba los cálculos sin considerar a los electrones de capa interna. De esta manera se tiene:

$$\psi = \varphi_{\text{coraza}} * \varphi_{\text{valencia}}$$

En esta teoría, esta función ψ es aproximada como una combinación lineal de los orbitales atómicos para formar los orbitales moleculares. De esta manera las funciones de onda para cada uno de los orbitales moleculares se expresan de la siguiente forma:

$$\psi_i = C_{i1} \varphi_1 + C_{i2} \varphi_2 + \dots + C_{in} \varphi_n$$

en donde ψ_i es el orbital molecular i-ésimo, φ_j es el orbital atómico (tipo Slater doble ξ) j-ésimo, y C_{ij} es el coeficiente del orbital atómico j-ésimo en el orbital molecular i-ésimo.

Después de una serie de sustituciones matemáticas, las cuales han sido explicadas por muchos autores (entre ellos, Jolly²), se llegan a las ecuaciones seculares:

$$\begin{aligned} C_1 (H_{11} - S_{11} E) + C_2 (H_{12} - S_{12} E) + \dots + C_n (H_{1n} - S_{1n} E) &= 0 \\ C_1 (H_{21} - S_{21} E) + C_2 (H_{22} - S_{22} E) + \dots + C_n (H_{2n} - S_{2n} E) &= 0 \\ \dots & \dots \\ C_1 (H_{n1} - S_{n1} E) + C_2 (H_{n2} - S_{n2} E) + \dots + C_n (H_{nn} - S_{nn} E) &= 0 \end{aligned}$$

en donde, los valores de las H_{ij} , denominadas integrales de Coulomb, son aproximados con los potenciales de ionización del estado de valencia, los cuales se pueden obtener de tablas de datos. Para los valores de las H_{ij} , se utiliza la siguiente correlación:

$$H_{ij} = 1.75 [(H_{ii} + H_{jj}) / 2] S_{ij}$$

Los valores de las S_{ij} , se denominan integrales de traslape, en donde $S_{ii} = 1$, y las S_{ij} se calculan de acuerdo a la siguiente ecuación

$$S_{ij} = \int \varphi_i * \varphi_j dt$$

De esta manera, se tiene un sistema de n ecuaciones, con n + 1 incógnitas, que son los coeficientes de las ecuaciones y el valor de la energía. La n + 1 ecuación viene de la condición de normalización:

$$\int \psi^2 dt = 1$$

De manera que se tiene un sistema de $n + 1$ ecuaciones con $n + 1$ incógnitas, que se resuelve por técnicas numéricas. Una vez que se tienen los valores de los coeficientes y de la energía, es posible conocer por completo los orbitales moleculares, con sus energías, valores de traslape, etcétera, y con todos estos valores es posible aplicar un análisis de población (el de Mulliken, por ejemplo) con lo que se pueden asignar valores de carga eléctrica.

DESCRIPCION DEL MODULO.

Dentro de los paquetes de cómputo, que utilizan el método de Huckel extendido, para calcular a las moléculas, se encuentra CACAO.

CACAO (Computed Aided Composition of Atomic Orbitals) es un conjunto de programas de cómputo creados en Fortran por Carlo Mealli³ en 1990. Este paquete adapta para una computadora personal (PC 286 o superior, con monitor a color, 640 Kb en RAM, disco duro de 20 Mb y coprocesador matemático) una versión del método de Huckel extendido de Hoffmann y adiciona todo un grupo de rutinas para el análisis y la visualización de los cálculos.

El primer requisito para correr los cálculos de orbitales moleculares de una molécula, es construir en un archivo de entrada, el modelo estructural de dicha molécula dentro de un formato determinado, en el cual se definen, las coordenadas internas (distancias de enlace, ángulos de enlace, ángulos de torsión), los átomos presentes en la molécula, el número de átomos presentes en la misma y su carga eléctrica, entre otros datos. De esta manera, el programa reconoce la presencia de elementos de simetría y como están relacionados los átomos entre sí. Entonces, los cálculos de orbitales moleculares son realizados, y se generan tres archivos para cada molécula.

- Archivo out, que contiene toda la información numérica de la molécula como matriz de carga, matriz de traslape, funciones de onda, matriz de Huckel, etc. La información que contiene este archivo, puede ser leída fuera de CACAO, a través de cualquier editor de textos.

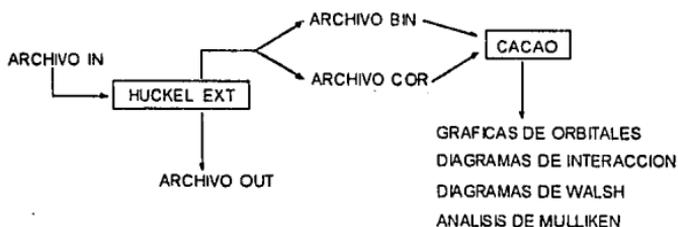
- Archivo bin, que contiene la información numérica de la molécula escrita en binario.

- Archivo cor, en el cual se encuentran las coordenadas cartesianas de la molécula.

Estos archivos son copiados con el nombre del archivo de entrada in, con las extensiones respectivas out, bin y cor. en el mismo directorio en el que se encuentran los archivos in de entrada.

Para poder correr CACAO son necesarios unicamente los archivos bin y cor. De esta manera, el usuario puede entrar a la visualización de:

- Gráficas de la estructura de una molécula.
- Gráficas tridimensionales de orbitales moleculares, viendo la molécula desde distintas orientaciones.
- Diagramas de interacción
- Diagramas de Walsh.
- Análisis de Mulliken.



Además de CACAO, existen muchos paquetes de cómputo que ilustran aspectos diversos de la química en general, pero en cuestión de enseñanza de teoría de orbitales moleculares a través de un paquete de cómputo, se encuentra el SPARTAN⁴, que utiliza la teoría de orbitales moleculares para ilustrar moléculas orgánicas. También existen otros esfuerzos en educación química como el de Allendoerfer⁵ que en 1990, publicó un artículo acerca de enseñanza de orbitales atómicos asistido por computadora, utilizando otro paquete distinto de CACAO. Cabe mencionar que existen otros paquetes de cómputo que podrían aprovecharse para la enseñanza de teoría de orbitales moleculares como Hyperchem, Sibiq, Molgen, Moby, etcétera, sin embargo debido al costo, el manejo y los

equipos de cómputo que son necesarios para correr estos paquetes, los coloca en desventaja ante CACAO de acuerdo a los objetivos de este módulo.

Debido a que la operación de CACAO implica la creación previa de los archivos de entrada (lo cual implica un gasto enorme en tiempo para aprender el formato adecuado de estos archivos) para la realización de cálculos a través del método de Huckel extendido, decidimos crear un módulo que evita la realización de los archivos de entrada y de los cálculos del Huckel extendido, ya que previamente hemos seleccionado los ejemplos a estudiar, construido sus respectivos archivos de entrada y almacenado los archivos bin y cor, de manera que el alumno selecciona el ejemplo y solo tiene que operar la etapa de visualización de resultados, lo cual es muy importante desde el punto de vista didáctico.

Los ejemplos.

Los diez ejemplos que se escogieron para formar parte de este módulo fueron sacados de libros de texto de estructura atómica^{6,7,8,9,10} y química orgánica^{11,12}. Estos ejemplos tratan de explicar conceptos fundamentales en estas áreas, por medio de la teoría de orbitales moleculares, además este conjunto de diez ejemplos abarca en gran parte los temas que se tocan más frecuentemente en las asignaturas involucradas, sin pretender ser exhaustivos.

Los diez ejemplos seleccionados son:

1. Orbitales atómicos. El objetivo de este ejemplo es hacer un recordatorio de los orbitales atómicos, presentando al átomo de níquel, de manera que el alumno pueda identificar la forma, el tamaño, el número de planos nodales y la energía de los orbitales atómicos de la capa de valencia.

2. Molécula de hidrógeno. Este ejemplo fue dividido en dos partes, en la primera parte se pretende que el alumno aprecie la relación existente entre distancia interatómica y energía por medio de un diagrama de Walsh. En la segunda parte, se pretende que el alumno identifique el enlace sigma y los orbitales moleculares en esta molécula, y por medio del diagrama de interacción que identifique la relación existente entre orbitales

atómicos y moleculares. De esta forma, con estos dos ejemplos el alumno se familiariza con todas las opciones y el manejo tanto del módulo, como del paquete.

3. Molécula de nitrógeno. El objetivo de este ejemplo es mostrar al alumno el enlace π y el mezclado s-p de los orbitales atómicos. Además, pretende explicar las propiedades magnéticas de esta molécula a través del diagrama de interacción.

4. Ácidos de halógenos. El objetivo de este ejemplo es explicar la fuerza ácida de los ácidos fluorhídrico, clorhídrico y bromhídrico, presentándole al alumno una tabla de valores experimentales, para que el alumno corrobore que esta información experimental concuerda con la información de carga eléctrica por átomo y distancia de enlace que se muestra a través del análisis de Mulliken. Además se pretende que el alumno identifique que combinaciones entre orbitales no son posibles debido a su simetría, como ocurre entre el orbital $1s$ del hidrógeno, con los orbitales de capa de valencia, p_x y p_y de los halógenos.

5. Molécula de dióxido de carbono. Este ejemplo está dividido en dos partes, en la primera se pretende que el alumno aprecie, mediante un diagrama de Walsh, la relación existente entre la geometría y la energía de esta molécula, a medida que el ángulo entre enlaces carbono-oxígeno, varía de 90° a 180° grados, pasando la molécula de doblada a lineal, y explique así, la geometría lineal que presenta esta molécula. En la segunda parte, se pretende que el alumno identifique a los orbitales HOMO y LUMO.

6. Molécula de agua. Este ejemplo está dividido en dos partes, en la primera se pretende que el alumno aprecie, mediante un diagrama de Walsh, nuevamente la relación existente entre la geometría y la energía de esta molécula, a medida que el ángulo entre enlaces oxígeno-hidrógeno, varía de 90° a 180° grados, pasando la molécula de doblada a lineal. En la segunda parte, se pretende que el alumno identifique a los orbitales que contienen a los electrones sin compartir del oxígeno.

7. Molécula de etileno. El objetivo de este ejemplo es mostrar al alumno los orbitales moleculares de tipo π , enlazantes y no enlazantes, en el enlace carbono-carbono, tan comunes en química orgánica.

8. Aromáticos. Este ejemplo pretende analizar el ataque de posiciones preferidas en una sustitución electrofílica aromática en el benceno, tolueno y nitrobenzeno, a través de los valores de carga eléctrica en las posiciones orto, meta y para.

9. Molécula de amoníaco. Este ejemplo ilustra las propiedades electrónicas que tiene esta molécula, la cual puede existir en forma aislada o bien coordinada a metales de transición.

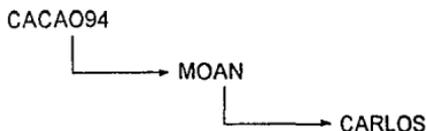
10. Complejo hexaamincobalto (III). En este ejemplo se explica la formación del complejo presentado, así como las propiedades electrónicas que posee.

Desarrollo del módulo.

Este módulo está conformado principalmente de seis elementos:

- archivo de instalación
- archivos de entrada
- archivos *.bin de información numérica y *.cor de coordenadas
- archivos de menús de selección de ejemplos,
- C'CAO
- la guía.

El archivo de instalación fue creado dentro del editor del sistema operativo ms-dos, como un archivo de tipo batch (*.bat), y su función es instalar el presente módulo educativo en una computadora personal. Este archivo se encarga de crear en el disco duro C el subdirectorio CACAO94, dentro de éste, el subdirectorio MOAN, y dentro de éste, el subdirectorio CARLOS:



Después de crear los subdirectorios, copia todos los archivos de entrada y los archivos bin de información numérica dentro del subdirectorio CARLOS, los archivos de menús de selección de ejemplos y CACAO dentro del subdirectorio MOAN, y fuera de todos los subdirectorios copia el propio archivo de instalación y la guía.

El nombre de este archivo es instal** y con sólo escribirlo estando dentro del disco de instalación, se ejecutan los comandos para instalar el módulo

Los archivos de entrada** (input files), contienen toda la información de la estructura de las moléculas seleccionadas (distancia entre moléculas, ángulos entre enlaces, átomos presentes, número de átomos presentes, carga de la molécula, etc.) y fueron creados con el formato que requiere CACAO. Con estos archivos de entrada, y por medio del programa EH (extended-Huckel), que se encuentra dentro de CACAO, se generaron los archivos out, bin y cor, que contienen toda la información numérica necesaria para entrar a CACAO

En este módulo, se buscó que el usuario pudiera observar todos los ejemplos disponibles a través de un menú principal, y con solo oprimir una tecla que identificara el ejemplo, el usuario lo seleccionara, e inmediatamente entrara a CACAO, ya con el archivo bin del ejemplo seleccionado. Para lograr lo anterior se creó un menú principal, en el cual cada uno de los ejemplos tenía asignado una tecla de función, desde F1 hasta F10, con la tecla de función F11 destinada para salir del menú. Para aquellos ejemplos que estaban conformados de dos o más partes se construyeron menús secundarios que mostraban las opciones, y de la misma forma que en el menú principal se seleccionan las opciones con una tecla de función asignada para cada opción, con la diferencia que la tecla de función F11 en lugar de salir del módulo, sale del menú secundario, para regresar al menú principal

Estos menús de selección de ejemplos, con los comandos que los hacen funcionales, están dentro de un conjunto de archivos bat**, los cuales fueron creados dentro del editor del sistema operativo ms-dos, con instrucciones para: mostrar las

**Ver apéndice.

pantallas** con los menús creados en archivos doc**, salir del menú principal, entrar a los menús secundarios y traer los archivos bin dentro de CACAO.

Además, estos archivos fueron creados a prueba de error, es decir que si el usuario oprime una tecla diferente a las de función, el archivo, le vuelve a mostrar el menú.

Estos archivos bat contienen instrucciones para que cuando salga el usuario de CACAO, una vez estudiado un ejemplo, automáticamente se regresa al menú.

El menú principal, que es el acceso a todo el módulo, se activa escribiendo TOM**, que es el nombre del archivo principal, que contiene todos los archivos de menús de selección de ejemplos.

La guía** es la última parte del desarrollo de este módulo, fue escrita con el procesador de palabras Word versión 6.0. Se hicieron dibujos de apoyo en la explicación de los ejemplos de molécula de hidrogeno, molécula de bióxido de carbono y molécula de agua creados en Chemwin.

Esta guía contiene una introducción donde se explica la filosofía del módulo, también cuenta con una explicación muy breve acerca de Huckel extendido, CACAO y TOM, y se explica de manera general cual es el manejo de CACAO. Después de los mencionados antecedentes, se describen los ejemplos, cada uno de los cuales consta de tres secciones: objetivo del ejemplo, recomendaciones de manejo de CACAO para la máxima explotación de la información y preguntas post-estudio del ejemplo.

**Ver apéndice.

RESULTADOS Y DISCUSION.

Una versión de sólo cinco ejemplos de este módulo de enseñanza, fué presentada a un grupo prueba de ocho alumnos de la Facultad de Química, que cursan el quinto semestre de las diferentes licenciaturas que se imparten en esta Facultad. Los ejemplos presentados fueron:

- Orbitales atómicos
- Molecula de hidrógeno
- Molécula de nitrógeno
- Acidos de halógenos
- Aromáticos

Debido a lo extenso de este módulo resultaba muy difícil que se presentaran todos los ejemplos al grupo piloto, y por esta razón se seleccionaron cinco de los ejemplos que ilustran conceptos que seguramente ya han visto en sus cursos de estructura atómica y química orgánica

Antes de entrar al manejo del modulo educativo, se les explicó a los ocho alumnos el manejo del módulo y del paquete CACAO, y con las guías del módulo en la mano, procedieron al estudio de cada uno de los ejemplos.

Ninguno de los alumnos tuvo problema alguno en el manejo del módulo y de CACAO, y gracias a la sección de comentarios, en donde se les cuestionaba que ejemplos o preguntas de la guía habían resultado confusos y se les pedía una opinión general acerca de la guía, pudimos saber que el ejemplo de los ácidos de halógenos resultaba confuso porque carecía de un soporte teórico previo, como lo manifestó el 75% de los alumnos; por lo cual decidimos incorporar una explicación teórica en la descripción de este ejemplo, que le permitiera al usuario explicar el comportamiento experimental de estos tres compuestos, por medio de la información de distribución de carga y distancia de enlace, que provee CACAO.

En un principio, se tenían preguntas que requerían de algún valor numérico para poder responderlas, y el 100% de los alumnos que erraban la respuesta no habían copiado la información numérica, que les proporcionaba CACAO, con lo cual no podían observar

una tendencia. Para resolver el problema anterior hemos decidido colocar estas preguntas, después de una tabla de valores numéricos, que el propio alumno tiene que llenar, de manera que forzamos al alumno a sacar la información numérica, para que la tenga a la mano y pueda explicar una tendencia.

Aparte de los dos problemas antes mencionados, los alumnos no tuvieron problema en responder las preguntas que se formulaban en la guía, ya que CACAO les proporcionó toda la información que requerían para responderlas.

Observamos que algunos de los alumnos se fatigaron cuando se encontraban en el cuarto o quinto ejemplo, por lo que creemos que con uno o dos ejemplos que se vean por día, es suficiente, ya que el tiempo promedio que se lleva la visualización completa de cada ejemplo es de cuarenta y cinco minutos, incluido en este tiempo, el que se utiliza para contestar las preguntas.

Todos los alumnos de este grupo piloto opinaron que esta guía es bastante útil para explicar conceptos que se vieron en sus clases donde se tocaban temas de teoría de orbitales moleculares, y consideraron que se deben tener previamente los conocimientos teóricos, y el módulo sirva para confirmarlos.

CONCLUSIONES.

Considero que este módulo educativo encontrará seguramente en un futuro próximo, un lugar dentro de los programas de estudio de las asignaturas de estructura de la materia, química orgánica, unión química y química inorgánica, que se imparten a nivel licenciatura dentro de esta Facultad.

De la prueba de este módulo con el grupo piloto de estudiantes, puedo concluir que sus principales cualidades son:

- proveer de dibujos de orbitales moleculares de moléculas no tan sencillas y diagramas de interacción más allá de la molécula de hidrógeno, imposibles de reproducir en un salón de clases,

- mostrar información numérica rápidamente, con sólo oprimir unas teclas,
- acostumbrar y familiarizar al alumno con los paquetes de cómputo y
- acercar a los alumnos a problemas más reales en la química.

Por todo lo anterior, creo firmemente que este instrumento computacional es muy completo, de manejo muy sencillo y que será tremendamente provechoso en la docencia. Sin embargo, al utilizar este paquete el método de Huckel extendido, con las consideraciones y aproximaciones que tiene, resulta ser impreciso. De esta manera no podemos considerar los valores que nos proporciona (por ejemplo de energía), como aceptables para muchos fines. Tampoco se puede utilizar este paquete para optimizar simetrías de moléculas ni tampoco en moléculas muy polares, ya que los cálculos que proporciona en estas moléculas son muy inexactos.

De la experiencia que se obtenga al aplicar este módulo a grupos de alumnos de las asignaturas relacionadas con los temas, se deberán hacer las correcciones y adaptaciones que se requieran, ya que de ninguna manera este es un módulo concluido y definitivo.

Debido a la forma modular en como está construido, es muy fácil que se reemplacen ejemplos, o que se adicionen otros, asimismo, la guía esta sujeta a que se le incorporen otros ejemplos y otras preguntas de interés. De esta forma se pueden conformar grupos de ejemplos específicos, de manera que se pueda tener, un módulo con ejemplos de química orgánica, otro con ejemplos de química inorgánica, etc.

REFERENCIAS.

- ¹ Hoffmann, R. *Journal of Chemical Physics*, **39**, [6], 1397-1412 (1963).
- ² Jolly, William L. *Modern Inorganic Chemistry*. McGraw-Hill, New York. (1984).
- ³ Mealli, C. and Proserpio, D.P., *Journal of Chemical Education*, **67**, 399-402 (1990).
- ⁴ Hchre W., Burke L., Slustringman A., Pietro W. *Experiments in computational organic chemistry*. Wavefunction, Inc. Irvine. (1993).
- ⁵ Allendoerfer, Robert D. *Journal of Chemical Education*, **67**, (1990).
- ⁶ Gray, Harry B. *Electrones y enlaces quimicos*. Reverté. México.(1970).
- ⁷ Offenhartz, Peter. *Atomic and molecular orbital theory*. McGraw-Hill, México. (1970).
- ⁸ Borden, Weston T. *Modern molecular theory for organic chemists*. Prentice-Hall, Englewood. (1975).
- ⁹ Streitwieser, Andrew. *Molecular orbital theory for organic chemists*. John Wiley, New York. (1961).
- ¹⁰ Jolly, William L. *Op. cit.*
- ¹¹ Mahan B.M. and Myers R. J. *University Chemistry*. The Benjamin/Cummings Pub. Co., Inc. Menlo Park, California (1987).
- ¹² Morrison R.T. and Boyd R.N. *Organic Chemistry*. Allyn and Bacon, Inc. Boston. (1966).

APENDICE.

ARCHIVO DE INSTALACION

rem Este archivo instala EL MODULO DE APOYO PARA LA ENSEÑANZA DE
TEORIA DE

rem ORBITALES MOLECULARES ASISTIDO POR COMPUTADORA

cls

echo off

md c:\cacao94

md c:\cacao94\moan

md c:\cacao94\moan\carlos

copy instal.bat c:

copy guia.doc c:

copy cacao94*.* c:\cacao94

copy cacao94\moan*.* c:\cacao94\moan

copy cacao94\moan\carlos*.* c:\cacao94\moan\carlos

C:

cd c:\cacao94\moan

cls

echo.

echo Instalacion completa Para entrar al menú con los ejemplos de este
echo módulo escribe TOM y oprime la tecla enter.

echo.

ARCHIVOS DE ENTRADA

ORBITALES ATOMICOS

1 0DIST 0 0 0
WF
0.,0.,0.,NI
1,-1,DU 0.604,180.,0.

MOLECULA DE HIDROGENO

2 0DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO
0.,0.,0.,DU
3,1, H 373,180.,0.
3,2, H 373,000.,0.
FMO
WF CM
2 1 1
0 WF
0 WF

MOLECULA DE HIDROGENO

2 0DIST 0 1 6
1.5,1.0,0.5,0.400,0.373,0.350
WF RC OP EL RO
0.,0.,0.,DU
3,1, H 1000,180.,0.
3,2, H 1000,000.,0.

MOLECULA DE NITROGENO

2 0DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO
0.,0.,0.,DU
3,1, N 0.547,180.,0.
3,2, N 0.547,000.,0.
FMO
WF CM
2 1 1
0 WF
0 WF

MOLECULA DE HF
2 0DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO NC
0.,0.,0.,DU
3,1, H 0.458,180.,0.
3,2, F 0.458,000.,0.
FMO
WF CM
2 1 1
0 WF
0 WF

MOLECULA DE HCL
2 0DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO NC
0.,0.,0.,DU
3,1, H 0.637,180.,0.
3,2,CL 0.637,000.,0.
FMO
WF CM
2 1 1
0 WF
0 WF

MOLECULA DE HBR
2 0DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO NC
0.,0.,0.,DU
3,1, H 0.707,180.,0.
3,2,BR 0.707,000.,0.
FMO
WF CM
2 1 1
0 WF
0 WF

MOLECULA DE CO2

3 0DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO
0.,0.,0., C
1,2, O 1.160,0.,0.
1,3, O 1.160,180.,0
FMO
WF CM
2 1 2
0 WF
0 WF

MOLECULA DE CO2

3 0DIST 0 1 6
134., 130., 120., 110., 100., 90.1
EL WF NC RC OP RO
0.,0.,0., C
1,2, O 1.160,1000.,90.
1,3, O 1.160,1000.,270.

MOLECULA DE AGUA

3 0DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO
0.,0.,0., O
1,2, H 0.958,217.75,0.
1,3, H 0.958,322.25,0
FMO
WF CM
2 1 2
0 WF
0 WF

MOLECULA DE AGUA

3 0DIST 0 1 6
134., 130., 120., 110., 100., 90.1
EL WF NC RC OP RO
0.,0.,0., O
1,2, H 0.958,1000.,90.
1,3, H 0.958,1000.,270.

MOLECULA DE ETILENO

6 0DIST
0.,0.,0.,DU
-1,1, C 0.70,0.,0.
-1,2, C 0.70,180.,0.
1,3, H 1.,120.,180.
1,4, H 1.,120.,0.
2,5, H 1.,120.,180.
2,6, H 1.,120.,0.
FMO
-2 3 3 0 0
1 3 4 2 5 6

MOLECULA DE BENCENO

12 0DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO NC
0.,0.,0.,DU
-1,1,BZ 0.547,180.,0.
FMO
WF CM
2 6 6
0 WF
0 WF

MOLECULA DE TOLUENO

15 0DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO NC
0.,0.,0.,DU
-1,1,BZ 0.647,180.,0.
-1,1,ME 2.650,105.,305.
FMO
2 6 9
0 nc
0 nc

MOLECULA DE NITROBENCENO

14 0DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO NC
0.,0.,0.,DU
-1,1,BZ 0.647,180.,0.
-1,12, N 2.650,105.,305
12,13, O 1.210,110.,90
12,14, O 1.210,230.,90
FMO
2 6 8
0 nc
0 nc

MOLECULA DE AMONIACO

4 0DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO NC
0.,0.,0.,DU
-1,1,AM 0.547,180.,0.
FMO
WF CM
2 1 3
0 WF
0 WF

COMPLEJO [Co(NH3)6] 3+

25 3DIST 0 0 0
WF RC OP EL RO
0.,0.,0.,CO
1,2,AM 2.000,90.,45.
1,6,AM 2.000,180.,0.
1,10,AM 2.000,90.,135.
1,14,AM 2.000,90.,225.
1,18,AM 2.000,0.,0.
1,22,AM 2.000,90.,315.
FMO
2 1 24 2 0

ARCHIVOS DE MENUS

ARCHIVO DEL MENU PRINCIPAL TOM.BAT

```
@echo off
:START
TYPE TOM.DOC
REPLY
if errorlevel 134 TOM
if errorlevel 133 goto F11
if errorlevel 69 TOM
if errorlevel 68 goto F10
if errorlevel 67 goto F9
if errorlevel 66 goto F8
if errorlevel 65 goto F7
if errorlevel 64 goto F6
if errorlevel 63 goto F5
if errorlevel 62 goto F4
if errorlevel 61 goto F3
if errorlevel 60 goto F2
if errorlevel 59 goto F1
TOM
:F1
copy c:\cacao94\moan\carlos\forma.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\forma.cor temp64
GOTO EN
:F2
HIDRO
GOTO EN
:F4
SECUN1
GOTO EN
:F3
copy c:\cacao94\moan\carlos\n2.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\n2.cor temp64
GOTO EN
:F5
BIOXI
GOTO EN
:F8
SECUN2
GOTO EN
:F6
AGUA
GOTO EN
:F7
copy c:\cacao94\moan\carlos\ethylen.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\ethylen.cor temp64
GOTO EN
:F9
copy c:\cacao94\moan\carlos\NH3.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\NH3.cor temp64
GOTO EN
:F10
copy c:\cacao94\moan\carlos\COMNH3.bin tempwf
```

```
copy c:\cacao94\moan\carlos\COMNH3.cor temp64
GOTO EN
:F11
GOTO CEN
:EN
cls
echo.
echo 1;33;5m Vas a entrar a CACAO 0;44;37m echo
echo Oprime una tecla para continuar
PAUSE
CACAO
TOM
:CEN
echo 40;37m^[23;18H
CLS
:END
```

ARCHIVO DEL MENU PRINCIPAL TOM.DOC

44;37m" [(23;18H

2J

02;05H

03;05H

04;05H

05;05H

1;37m Módulo de apoyo para la enseñanza de teoría de orbitales molecular
1;33m Menú Principal 0;44;37m

06;15H

F1

ORBITALES ATOMICOS

37m

07;15H

08;15H

06;42H

07;42H

08;42H

F2

MOLECULA DE HIDROGENO

37m

09;15H

10;15H

11;15H

09;42H

10;42H

11;42H

F3

MOLECULA DE N2 37m

F4

ACIDOS DE HALOGENOS

37m

12;15H

13;15H

14;15H

12;42H

13;42H

14;42H

F5

MOLECULA DE CO2

37m

F6

MOLECULA DE H2O

37m

15;15H

16;15H

17;15H

15;42H

16;42H

17;42H

F7

MOLECULA DE ETILENO 37m

F8

AROMATICOS

18;15H

19;15H

20;15H

18;42H

19;42H

20;42H

F9

MOLECULA DE NH3

37m

F10

COMPLEJO [Co(NH3)6] 3+

21;30H

22;30H

23;30H

24;15H

24;10H

F11

SALIDA DEL MENU

37m

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

ARCHIVO DEL MENU SECUNDARIO HIDRO.BAT

```
@echo off
:START
TYPE HIDRO.DOC
REPLY
if errorlevel 134 HIDRO
if errorlevel 133 goto F11
if errorlevel 61 HIDRO
if errorlevel 60 goto F2
if errorlevel 59 goto F1
HIDRO
:F1
copy c:\cacao94\moan\carlos\ENLICE.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\ENLICE.cor temp64
GOTO EN
:F2
copy c:\cacao94\moan\carlos\ENLACE.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\ENLACE.cor temp64
GOTO EN
:F11
TOM
:EN
cls
echo.
echo 1;33;5m Vas a entrar a CACAO 0;44;37m
echo Oprime una tecla para continuar
PAUSE
CACAO
HIDRO
:END
```

ARCHIVO DEL MENU SECUNDARIO HIDRO.DOC

44;37m*{(23;18H

2J

02;09H

03;09H

04;09H

05;25H

06;25H

07;25H

09;25H

10;25H

11;25H

20;25H

21;25H

22;25H

23;15H

24;15H

1;33m

MOLECULA DE HIDROGENO

0;44;37m

F1

CON DIAGRAMA DE WALSH

37m

F2

CON DIAGRAMA DE INTERACCION

F11

REGRESA AL MENU PRINCIPAL 37m

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

ARCHIVO DEL MENU SECUNDARIO SECUN1.BAT

```
@echo off
:START
TYPE SECUN1.DOC
REPLY
if errorlevel 134 SECUN1
if errorlevel 133 goto F11
if errorlevel 62 SECUN1
if errorlevel 61 goto F3
if errorlevel 60 goto F2
if errorlevel 59 goto F1
SECUN1
:F1
copy c:\cacao94\moan\carlos\HF.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\HF.cor temp64
GOTO EN
:F2
copy c:\cacao94\moan\carlos\HCL.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\HCL.cor temp64
GOTO EN
:F3
copy c:\cacao94\moan\carlos\hbr.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\hbr.cor temp64
GOTO EN
:F11
TOM
:EN
cls
echo.
echo 1;33;5m Vas a entrar a CACAO 0;44;37m
echo Oprime una tecla para continuar
PAUSE
CACAO
SECUN1
:END
```

ARCHIVO DEL MENU SECUNDARIO SECUNI.DOC

44;37m`{[23;18H

2J

02;09H

03;09H

04;09H

05;25H

06;25H

07;25H

09;25H

10;25H

11;25H

13;25H

14;25H

15;25H

20;25H

21;25H

22;25H

23;15H

24;15H

1;33m

ACIDOS DE HALOGENOS

0;44;37m

F1

HF

37m

F2

HCl

F3

HBr

37m

F11

REGRESA AL MENU PRINCIPAL 37m

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

ARCHIVO DEL MENU SECUNDARIO BIOXI.BAT

```
@echo off
:START
TYPE BIOXI.DOC
REPLY
if errorlevel 134 BIOXI
if errorlevel 133 goto F11
if errorlevel 61 BIOXI
if errorlevel 60 goto F2
if errorlevel 59 goto F1
BIOXI
:F1
copy c:\cacao94\moan\carlos\CO2VAR.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\CO2VAR.cor temp64
GOTO EN
:F2
copy c:\cacao94\moan\carlos\CO2.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\CO2.cor temp64
GOTO EN
:F11
TOM
:EN
cls
echo.
echo 1;33;5m Vas a entrar a CACAO 0;44;37m
echo Oprime una tecla para continuar
PAUSE
CACAO
BIOXI
;END
```

ARCHIVO DEL MENU SECUNDARIO BIOXI.DOC

44;37m' [[23;18H
2J

02;09H

03;09H

04;09H

05;25H

06;25H

07;25H

09;25H

10;25H

11;25H

20;25H

21;25H

22;25H

23;15H

24;15H

1;33m	MOLECULA DE CO2	0;44;37m
-------	-----------------	----------

CON DIAGRAMA DE WALSH 37m

CON DIAGRAMA DE INTERACCION

REGRESA AL MENU PRINCIPAL 37m

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

ARCHIVO DEL MENU SECUNDARIO AGUA.BAT

```
@echo off
:START
TYPE AGUA.DOC
REPLY
if errorlevel 134 AGUA
if errorlevel 133 goto F11
if errorlevel 61 AGUA
if errorlevel 60 goto F2
if errorlevel 59 goto F1
AGUA
:F1
copy c:\cacao94\moan\carlos\H2OVAR.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\H2OVAR.cor temp64
GOTO EN
:F2
copy c:\cacao94\moan\carlos\H2O.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\H2O.cor temp64
GOTO EN
:F11
TOM
:EN
cls
echo.
echo 1;33;5m Vas a entrar a CACAO 0;44;37m
echo Oprime una tecla para continuar
PAUSE
CACAO
AGUA
:END
```

44;37m*[[23;18H

2J

02;09H

03;09H

04;09H

05;25H

06;25H

07;25H

09;25H

10;25H

11;25H

20;25H

21;25H

22;25H

23;15H

24;15H

1;33m

MOLECULA DE AGUA

0;44;37m

F1

CON DIAGRAMA DE WALSH

37m

F2

CON DIAGRAMA DE INTERACCION

F11

REGRESA AL MENU PRINCIPAL 37m

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

ARCHIVO DEL MENU SECUNDARIO SECUN2.BAT

```
@echo off
:START
TYPE SECUN2.DOC
REPLY
if errorlevel 134 SECUN2
if errorlevel 133 goto F11
if errorlevel 62 SECUN2
if errorlevel 61 goto F3
if errorlevel 60 goto F2
if errorlevel 59 goto F1
SECUN2
:F1
copy c:\cacao94\moan\carlos\BENCEN.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\BENCEN.cor temp64
GOTO EN
:F2
copy c:\cacao94\moan\carlos\TOLUEN.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\TOLUEN.cor temp64
GOTO EN
:F3
copy c:\cacao94\moan\carlos\NITROB.bin tempwf
copy c:\cacao94\moan\carlos\NITROB.cor temp64
GOTO EN
:F11
TOM
:EN
cls
echo.
echo 1;33;5m Vas a entrar a CACAO 0;44;37m
echo Oprime una tecla para continuar
PAUSE
CACAO
SECUN2
:END
```

ARCHIVO DEL MENU SECUNDARIO SECUN2.DOC

44;37m*[[23;18H

2J

02;09H

03;09H

04;09H

05;25H

06;25H

07;25H

09;25H

10;25H

11;25H

13;25H

14;25H

15;25H

20;25H

21;25H

22;25H

23;15H

24;15H

41;37m

44;37m

1;33m

AROMATICOS

0;44;37m

F1

BENCENO

37m

F2

TOLUENO

F3

NITROBENCENO

37r

F11

REGRESA AL MENU PRINCIPAL 37m

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

PANTALLAS

PANTALLA DEL MENU PRINCIPAL

Módulo de apoyo para la enseñanza de teoría de orbitales moleculares
Menú Principal

- | | | | |
|----|---------------------|-----|--------------------------|
| F1 | ORBITALES ATOMICOS | F2 | MOLECULA DE HIDROGENO |
| F3 | MOLECULA DE N2 | F4 | ACIDOS DE HALOGENOS |
| F5 | MOLECULA DE CO2 | F6 | MOLECULA DE H2O |
| F7 | MOLECULA DE ETILENO | F8 | AROMATICOS |
| F9 | MOLECULA DE NH3 | F10 | COMPLEJO [Co(NH3)6] 3+ |

F11 SALIDA DEL MENU

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

PANTALLA DEL MENU DE LA MOLECULA DE HIDROGENO

MOLECULA DE HIDROGENO

F1 CON DIAGRAMA DE WALSH

F2 CON DIAGRAMA DE INTERACCION

F11 REGRESA AL MENU PRINCIPAL

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

PANTALLA DEL MENU DE ACIDOS DE HALOGENOS

ACIDOS DE HALOGENOS

F1 HF

F2 HCl

F3 HBr

F11 REGRESA AL MENU PRINCIPAL

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

PANTALLA DEL MENU DE LA MOLECULA DE BIXIDO DE CARBONO

MOLECULA DE CO2

F1 CON DIAGRAMA DE WALSH

F2 CON DIAGRAMA DE INTERACCION

F11 REGRESA AL MENU PRINCIPAL

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

PANTALLA DEL MENU DE LA MOLECULA DE AGUA

MOLECULA DE AGUA

F1 CON DIAGRAMA DE WALSH

F2 CON DIAGRAMA DE INTERACCION

F11 REGRESA AL MENU PRINCIPAL

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

PANTALLA DEL MENU DE AROMATICOS

AROMATICOS

F1 BENCENO

F2 TOLUENO

F3 NITROBENCENO

F11 REGRESA AL MENU PRINCIPAL

OPRIMA LA TECLA DE FUNCION CORRESPONDIENTE

MODULO DE APOYO PARA LA ENSEÑANZA DE TEORIA DE ORBITALES MOLECULARES

GUIA PARA EL USUARIO

Contenido

-Introducción	1
-Huckel Extendido.....	2
-CACAO	2
-TOM.....	3
-Uso de CACAO.....	3
-Descripción de los ejemplos.....	3
-Orbitales atómicos.....	3
-Molécula de hidrógeno.....	4
-Molécula de nitrógeno.....	5
-Acidos de halógenos.....	6
-Molécula de bióxido de carbono.....	7
-Molécula de agua.....	8
-Molécula de etileno.....	9
-Aromáticos.....	10
-Molécula de amoniaco.....	10
-Complejo hexamincobalto (III).....	11
-Comentarios.....	11
-Referencias.....	12

Introducción

Esperamos que esta guía te ayude en el manejo del presente módulo educativo, en donde encontrarás un conjunto de ejemplos que te explicarán el comportamiento químico de las moléculas por medio de la Teoría de Orbitales Moleculares.

Este módulo está diseñado para ser estudiado progresivamente, de manera que estudies primero las moléculas mas sencillas, y después las mas complejas.

Además, este módulo te provee de información que no puedes apreciar en tus cursos de Estructura atómica, debido a que en un salón de clases resulta imposible la

demonstración de algunos tópicos, que son fáciles de exponer gracias a la paquetería de cómputo con que se cuenta actualmente.

Huckel Extendido

La teoría de Huckel Extendido es una ampliación de la Teoría de Huckel acerca de los electrones π y fue desarrollada por Roald Hoffmann¹ en 1963.

En esta Teoría, en lugar de hacer una separación entre electrones π y σ , se realiza la separación de los electrones de capa interna y los electrones de la capa de valencia, considerando para los cálculos sólo a estos últimos. Gracias a esta adaptación fue posible realizar los cálculos tanto para moléculas orgánicas como para inorgánicas.

Este método utiliza Combinaciones Lineales de Orbitales Atómicos (LCAO) para representar a los orbitales moleculares, y debido a las aproximaciones que se hacen (usa valores empíricos para representar algunas integrales en lugar de calcularlas), este método queda restringido únicamente para explicar aspectos cualitativos, como relaciones estructura-estabilidad de las moléculas, forma de los orbitales, interacciones HOMO-LUMO, barreras rotacionales, etc.

Las ventajas de este método son: simplicidad, poca demanda de cómputo y el ser muy exitoso con todo y las aproximaciones empleadas, de manera que en los cálculos se pueden analizar tendencias en el comportamiento químico y valores comparativos.

C A C A O

CACAO es un conjunto de programas de cómputo desarrollado por Carlo Mealli² en 1990. Este paquete adapta para una computadora personal, una versión del método de Huckel Extendido y adiciona todo un grupo de rutinas para el análisis y visualización de los cálculos. De esta forma, el usuario de CACAO puede construir:

- Gráficas de la estructura de una molécula.
- Gráficas de orbitales moleculares, viendo la molécula desde distintas orientaciones.
- Diagramas de interacción: que son gráficas de energía que muestran las contribuciones de los orbitales atómicos para formar los orbitales moleculares.
- Diagramas de Walsh: que son gráficas de energía de orbitales, en función de una coordenada espacial variable
- Análisis de población de Mulliken: que es la información de distribución de carga en los orbitales moleculares.

Lo único que necesita CACAO para poder calcular a una molécula dada, es un archivo de entrada con la estructura de la molécula (ángulos de enlace, número de

átomos en la molécula, cuales son los átomos presentes en la misma, distancia de enlace, etc.), pero es algo que tu no tendrás que hacer, ya que para todas las moléculas presentadas, hemos construido los archivos de entrada y además hemos archivado los cálculos de las mismas, de manera que solo obtendrás la información y podrás consultar todo lo que quieras de cada una de las moléculas presentadas.

T O M

Tom es solo un menú que nos muestra algunas moléculas que ya han sido calculadas previamente por medio de CACAO y con solo oprimir una de las teclas desde F1,F2... hasta F12, seleccionamos el ejemplo deseado e inmediatamente entramos a CACAO.

Para activar este menú basta con escribir la palabra *tom* y oprimir la tecla *enter*.

Para salirte del menú solo tienes que oprimir la tecla F12 como lo indica el menú.

U S O D E C A C A O

Para seleccionar lo que quieras ver por medio de CACAO tienes que ir contestando preguntas de respuesta opcional muy sencillas, en las cuales se te presentarán las opciones separadas por una diagonal, y a continuación se te presentarán las teclas con que seleccionarás dichas opciones separadas también por una diagonal, además se te presenta al finalizar la pregunta cual es el default, el cual seleccionas con sólo oprimir la tecla *enter*. Por ejemplo, una de las preguntas que se te presentan comunmente al entrar a CACAO es:

Interaction diagram MO drawings? (any ch return)

si quieres ver un dibujo de orbital molecular , con solo oprimir la tecla *enter*, que es equivalente a *return*, habrás seleccionado esa opción, pero si por el contrario, quieres ver un diagrama de interacción, con escribir cualquier letra y oprimir la tecla *enter* seleccionarás esta opción. Otra de las preguntas que comunmente aparecen es:

draw only the structure? (Def-N)

donde con solo oprimir la tecla *enter* eliges la respuesta por default que es no y el dibujo será no solo de la estructura sino con los orbitales, y si quieres que el dibujo sea unicamente de la estructura de la molécula escribes la letra *Y* y oprimes la tecla *enter*. De esta manera tan sencilla se presentan todas las preguntas de CACAO, por lo que no tendrás ningún problema en el manejo de este paquete

Descripción de los ejemplos

F1 : Orbitales atómicos. El objetivo de este ejemplo es hacer un recordatorio de los orbitales atómicos, presentando al átomo de níquel, de manera que el alumno pueda identificar la forma, el tamaño, el número de planos nodales y la energía de los orbitales atómicos de la capa de valencia.

Recomendaciones:

- Grafica todos los orbitales con los defaults.
- Grafica los orbitales #1, #4 y #7 viéndolos desde otro eje.

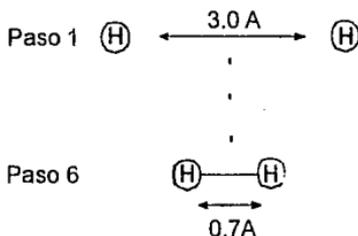
Preguntas:

Llena la siguiente tabla :

#orbital	nombre del orbital	energía	#de superficies nodales
1			
2			
3			
4			
5			
6			
7			
8			
9			

F2 : Molécula de hidrógeno.

f1 : Con diagrama de Walsh. En este ejemplo se han hecho seis cálculos de la molécula de hidrógeno a diferentes distancias entre los átomos de hidrógeno para poder construir un diagrama de Walsh, en el cual apreciarás la relación existente entre distancia interatómica y energía, a medida que se aproximan los átomos de hidrógeno. Las distancias entre los átomos de hidrógeno son: 3.0 Å, 2.0 Å, 1.0 Å, 0.8 Å, 0.746 Å (distancia de enlace en la molécula de H₂) y 0.7 Å, siendo el paso número 1 a 3.0 Å, el paso 2 a 2.0 Å, y así sucesivamente.



f2 : Con diagrama de interacción. En este ejemplo identificarás el enlace sigma, los orbitales moleculares en la molécula de hidrógeno y por medio del

diagrama de interacción, la relación entre los orbitales atómicos con los correspondiente orbitales moleculares.

Recomendaciones:

- Grafica el orbital #1 y #2 desde el eje Z (uno a la vez).
- Grafica con números, símbolos y pelotas.
- Observa el diagrama de Walsh.
- Ve el diagrama de interacción en el intervalo de energía desde -20 a 10 eV.

Preguntas:

¿Cuántos planos nodales tienen cada uno de los orbitales?

Escribe la forma general de las combinaciones lineales de orbitales atómicos (LCAO) para cada orbital molecular.

¿Cómo va cambiando la energía de los orbitales cuando se van aproximando los átomos de hidrógeno?

¿Cómo cambia la energía total cuando se aproximan los átomos de hidrógeno?

¿Qué significan los colores verde, amarillo y rojo en las líneas de los diagramas de interacción?

F3 : Molécula de nitrógeno. El objetivo de este ejemplo es mostrar al alumno el enlace pi y el mezclado s-p de los orbitales atómicos. Además, pretende explicar las propiedades magnéticas de esta molécula a través del diagrama de interacción.

Recomendaciones:

- Entra a los diagramas de interacción y cambia los valores por default de energía mínima y máxima, a -35 y 65 eV. respectivamente. para que puedas apreciar todos los orbitales.
- Identifica todo lo que la pantalla presenta en el diagrama de interacción.
- Grafica todos los orbitales moleculares.

Preguntas:

¿Porqué no aparecen los orbitales 1s de cada átomo?

A partir del diagrama de interacción contesta si la molécula de nitrógeno es diamagnética o paramagnética, y explica porque.

¿Qué diferencias existirían entre el diagrama de interacción de esta molécula y el de la molécula de oxígeno?

¿Porqué hay ocho orbitales moleculares?

Se sabe que si están muy próximos en energía los orbitales atómicos s y p en un átomo, se mezclarán y los orbitales que resulten formarán eventualmente orbitales moleculares ¿Ocurre esto en la molécula de nitrógeno? Explicalo de acuerdo al diagrama de interacción.

¿Cuales orbitales son de tipo sigma y cuales son de tipo pi?

F4 : Acidos de halógenos. El objetivo de este ejemplo es explicar la fuerza ácida de los compuestos presentados, de acuerdo con los siguientes datos:

	HF	HCl	HBr
Energía de disociación (kJ/mol)	568.1	432.0	366.2
Distancia de enlace (ang)	0.917	1.275	1.414

Encontrándose experimentalmente que la fuerza ácida de estos tres compuestos varía de la siguiente manera. $\text{HBr} > \text{HCl} > \text{HF}$

- F1 : Acido fluorhídrico.
- F2 : Acido clorhídrico.
- F3 : Acido bromhídrico.

Recomendaciones:

-Entra a los diagramas de interacción, y cambia los valores por default de energía mínima y máxima, a -50 y 20 eV, respectivamente, para que puedas apreciar todos los orbitales

-Ten cuidado con la numeración de los orbitales, en los diagramas de interacción, por ejemplo el orbital número 4 y que es de tipo s, no es un orbital 4s necesariamente.

-Ten cuidado en tu análisis, con los colores en las líneas de los diagramas de interacción, verificando el porcentaje que está aportando cada orbital atómico.

-En las gráficas de los orbitales, obsérvalos desde el eje X ó Y, y rota la molécula, 25 grados en el eje Y ó Z si la estas viendo desde el eje X, ó 25 grados en eje X ó Z si la estás viendo desde el eje Y.

-Después de ver el diagrama de interacción o las gráficas de los orbitales moleculares, entra al análisis de Mulliken, por medio del menú que se presenta al final de la pantalla. El primer letrero que se presentará al entrar es: *enter minimum orbital contribution (DEF: 1.0%)*, que indica la mínima contribución de un orbital atómico para formar un orbital molecular, y con oprimir la tecla *enter* se mantiene el 1% del default, que es el más adecuado para el análisis de Mulliken, después aparece el siguiente letrero: *enter MO number (max:5) [CR:exit]*, en donde debes seleccionar los orbitales moleculares que quieres analizar y aparecerá en la pantalla el porcentaje con

el que los orbitales atómicos contribuyeron para formar los orbitales moleculares; después de esto aparecerá el siguiente menú: *[CR E Z = Exit Energies Mulliken Anal.]*, donde seleccionarás Mulliken escribiendo Z y oprimiendo la tecla *enter*. A continuación se presentarán los átomos de la molécula numerados, y con escribir el número que corresponde al átomo que quieras ver y oprimir la tecla *enter*, aparecerá el análisis de Mulliken para el átomo seleccionado. Si quieres ver el análisis de Mulliken para más de un átomo a la vez, tienes que escribir los números de los átomos separados por una coma. En el análisis de Mulliken, la primera columna que aparece es la de carga neta por átomo, y las siguientes muestran el número de electrones que como carga están presentes en cada uno de los orbitales.

-Ya dentro del análisis de Mulliken, copia la información acerca de carga neta por átomo y distancia de enlace, y relacionala con la polarización, comparando los valores entre las tres moléculas.

Preguntas:

¿Porqué hay dos orbitales de carácter p de no enlace?

Se sabe que a medida que aumenta la electronegatividad de los átomos, sus orbitales atómicos aumentan en energía. ¿Puedes observar este comportamiento en los diagramas de interacción de los tres ácidos? Explica tu respuesta.

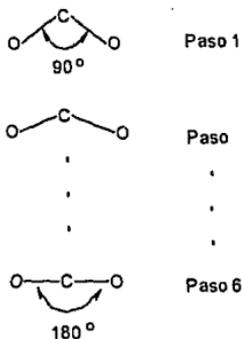
Llena la siguiente tabla:

	HF	HCl	HBr
Carga eléctrica del H			
Carga del halógeno			
Distancia de enlace			

Con base en la tabla anterior, escribe en orden ascendente la fuerza ácida de las tres moléculas. Concuerta este comportamiento con los datos teóricos.

F5 : Molécula de bióxido de carbono.

f1 : Con diagrama de Walsh. En este ejemplo se han hecho seis cálculos de la molécula de bióxido de carbono a diferentes ángulos entre enlaces carbono oxígeno para poder construir un diagrama de Walsh, a partir del cual apreciarás la relación que existe entre la forma y la energía a medida que el ángulo varía a 90, 100, 120, 140, 160 y 180 grados (ángulo de enlace), siendo el paso 1 a 90 grados, el paso 2 a 100 grados, y así sucesivamente.



f2 : Con diagramas de interacción.

Recomendaciones:

- Entra a los diagramas de interacción y cambia los valores default de energía mínima y máxima, a -40 y 80 eV. respectivamente, para que puedas apreciar todos los orbitales.
- Identifica a todos los orbitales ocupados y al LUMO en el diagrama de interacción.
- Entra al diagrama de Walsh.
- Dibuja cada uno de los orbitales ocupados desde el paso 1 hasta el 6, y observa como varía la energía a medida que se abre el ángulo.

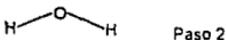
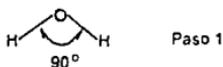
Preguntas:

- ¿Cómo cambia la energía total cuando se alejan los átomos de oxígeno al abrirse el ángulo?
- ¿Qué orbitales cambian más de energía cuando cambia el ángulo?
- ¿Cuales son los números de los orbitales HOMO y LUMO?
- ¿Cómo explicas que la molécula de bióxido de carbono sea lineal?

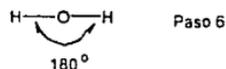
F6 : Molécula de agua.

f1 : Con diagrama de Walsh. En este ejemplo se han hecho seis cálculos de la molécula de agua a diferentes ángulos entre enlaces oxígeno hidrógeno para poder construir un diagrama de Walsh, a partir del cual apreciarás la relación que existe entre la forma y la energía a medida que el ángulo varía a 90, 104 (ángulo de enlace), 120, 140, 160 y 180 grados,

siendo el paso 1 a 90 grados, el paso 2 a 104 grados, y así sucesivamente.



·
·
·



f2 : Con diagrama de interacción.

Recomendaciones:

- Entra a los diagramas de interacción y cambia los valores default de energía mínima y máxima, a -40 y 20 eV. respectivamente, para que puedas apreciar todos los orbitales.
- Identifica a todos los orbitales ocupados y al LUMO en el diagrama de interacción.
- Entra al diagrama de Walsh.
- Dibuja cada uno de los orbitales ocupados desde el paso 1 hasta el 6, y observa como varía la energía a medida que se abre el ángulo.

Preguntas:

- ¿Como cambia la energía total cuando se alejan los átomos de hidrógeno al abrirse el ángulo?
- ¿Qué orbitales cambian más de energía cuando cambia el ángulo?
- ¿Cuales son los números de los orbitales HOMO y LUMO?
- ¿Cómo explicas que la molécula de agua no sea lineal?
- ¿Cuántos electrones tiene sin compartir el átomo de oxígeno?

¿Cuales orbitales contienen los electrones no compartidos del átomo de oxígeno?

F7 : Molécula de etileno. El objetivo de este ejemplo es mostrar al alumno los orbitales moleculares de tipo pi, enlazantes y no enlazantes, en el enlace carbono-carbono.

Recomendaciones:

- Entra a los diagramas de interacción y encuentra los valores por default de energía mínima y máxima, para que puedas apreciar todos los orbitales.
- Grafica todos los orbitales desde la orientación adecuada aprovechando la tridimensionalidad del paquete.

Preguntas:

¿Cuales orbitales son del tipo sigma enlazante y cuales son sigma antienlazante?

¿Cuales orbitales son del tipo pi enlazante y cuales son pi antienlazante?

¿Cuales son los orbitales moleculares que contribuyen principalmente a la formación del doble enlace?

Si el etileno actua como una base de Lewis, ¿Que orbitales serian los donadores de electrones?

Si se rota el enlace carbono-carbono 90 grados ¿Qué sucede con el doble enlace?

F8 : Aromáticos. Este ejemplo pretende explicar el ataque de posiciones preferidas en una sustitución electrofílica aromática en los compuestos presentados.

f1 : Benceno.

f2 : Tolueno.

f3 : Nitrobenceno.

Recomendaciones:

- Grafica solo la estructura de cada uno de los compuestos aromáticos, representando a los átomos con números y copia los números de los átomos de carbono en las posiciones orto, meta y para y dibújalos en papel.
- Entra al análisis de Mulliken, y copia la información de carga neta de cada una de las moléculas presentadas, especialmente en las posiciones orto, meta y para, en los dibujos que hiciste

Preguntas:

Llena la siguiente tabla:

	benceno	tolueno	nitrobenceno
Carga en la posición orto			
Carga en la posición meta			
Carga en la posición para			

¿cuales de los compuestos aromáticos son orto para directores y cuales meta directores en una sustitución electrofílica?

F9 : Molécula de amoniaco. Este ejemplo ilustra las propiedades electrónicas que tiene esta molécula, la cual puede existir en forma aislada o bien coordinada a metales de transición.

Recomendaciones:

-Entra a los diagramas de interacción y cambia los valores default de energía

mínima y máxima, a -35 y 20 eV. respectivamente, para que puedas apreciar todos los orbitales.

-Observa los orbitales moleculares desde el eje X.

-Entra al análisis de Mulliken, y copia la información electrónica que se te presenta.

Preguntas:

¿Cuántos electrones tiene sin compartir el nitrógeno del amoniaco?

¿Cuál es el número del orbital HOMO?

¿Cuales orbitales contienen a los electrones no compartidos del nitrógeno?

Llena la siguiente tabla:

Carga de cada hidrógeno:

Carga del nitrógeno:

¿Hacia adonde apunta el vector de momento dipolar de la molécula?

F10: Complejo hexamincobalto (III). En este ejemplo se explica la formación del complejo presentado, así como las propiedades electrónicas que posee.

Recomendaciones:

-Observa el diagrama de interacción con los valores default de energía.

-Observa los orbitales moleculares desde la orientación adecuada.

-Dibuja solo la estructura del complejo sin los orbitales.

Preguntas:

¿Cuántos electrones aparecen en el cobalto en la capa de valencia? ¿por que?

¿Con qué orbitales de los grupos amonio se enlaza mas fuertemente el catión cobalto?

En términos de orbitales moleculares, ¿qué características debe de tener el ácido de Lewis que reaccionará frente el amoniaco como base de Lewis?

¿El complejo es diamagnético o paramagnético? ¿por qué?

COMENTARIOS

Esperamos que este módulo haya sido de gran utilidad para ti. Si tienes alguna duda respecto a esta guía o al módulo consulta a tu asesor. Para el perfeccionamiento de este módulo educativo, te pedimos a continuación, que respondas unas breves preguntas acerca del mismo.

¿Qué preguntas de esta guía te parecieron confusas?

¿Qué preguntas son claras pero difíciles de responder?

¿Qué ejemplos crees que faltan en este módulo?

¿Qué ejemplos crees que están de más en este módulo?

¿Qué opinión general tienes de este módulo educativo y de la guía?

REFERENCIAS

Los ejemplos presentados en este módulo fueron seleccionados de libros de texto de Química Orgánica e Inorgánica^{1,2,3,4} así como de textos de Estructura Atómica^{5,6}.

¹Hoffmann, R. *Journal of Chemical Physics*, 39, [6], 1397-1412 (1963).

²Mealli, C. and Proserpio, D.P., *Journal of Chemical Education*, 67, 399-402 (1990).

³Mahan B.M. and Myers R. J. "University Chemistry" 4th ed. The Benjamin/Cummings Pub. Co., Inc. Menlo Park, California (1987).

⁴Morrison R.T. and Boyd R.N. "Organic Chemistry" 2nd. ed. Allyn and Bacon, Inc. Boston (1966).

⁵Streitwieser, Andrew. Molecular orbital theory for organic chemists. John Wiley, New York, 1961.

⁶Borden, Weston T. Modern molecular theory for organic chemists. Prentice-Hall, Englewood, 1975.

Gray, Harry B. *Electrones y enlaces químicos*. Reverté, México. 1970.

* Offenhartz, Peter. *Atomic and molecular orbital theory*. McGraw-Hill, México. 1970.