



UNIVERSIDAD DE LA HABANA

TAREA PARA EL CÁLCULO DE UNA MOLÉCULA MEDIANTE EL MÉTODO HMO SIMPLE

1. Descargar todos los ficheros que están en el directorio <http://karin.fq.uh.cu/MMN/HMO/>.
2. Seleccionar una molécula conjugada de trabajo.
3. Dibujar la estructura de la molécula seleccionada numerando todos los centros que representan átomos conjugados
4. Construir la matriz topológica de Hückel en el papel.

En los casos de átomos de carbono los términos diagonales se dejan nulos pues la γ_0 está implícita.

En los que son heteroátomos o carbonos considerados como heteroátomos (caso del grupo metilo) se usa $\gamma_0 + h_x$ y solo se escribe h_x .

En los términos no diagonales se pone $k_{\mu\nu} = \beta_{\mu\nu} / \beta_0$. Este valor es unitario cuando hay enlace π y se trata de dos átomos de carbono conjugados, pues $\beta_{\mu\nu} = \beta_0$.

Los valores de $k_{\mu\nu}$ aparecen en la literatura de formas muy variadas. No obstante, se proponen algunos valores, cuando deben ser diferentes de 1:

$k_{C=O} = 1.1$	$k_{C-O} = 0.6$	$k_{C-N} = 1.3$ (aminas)
$k_{C-F} = 1$	$k_{C-Cl} = 0.6$	$k_{C-Br} = 0.4$

5. Se procede a correr el programa. Si se trata de Windows de 32 bits se usa el `hmo.exe`, si es de 64 bits el `hmo64.exe`. La entrada de los datos se hace desde la terminal en la pantalla Windows.
6. Lo primero que debe establecerse es que la salida (output) se debe escribir en un fichero, para el que se pide el nombre a continuación. El programa guarda este fichero al terminar el cálculo en el mismo directorio donde se trabaja.
7. A continuación, se pide el nombre o identificación de la molécula que se desea calcular.
8. Después se debe entrar el número total de electrones π , provenientes de los orbitales atómicos p_z que se desea considerar para la molécula.
9. Entonces se van entrando los valores de los términos en la matriz de Hückel que se habían escrito en la matriz topológica del punto 3.
10. Al finalizar, el programa diagonaliza la matriz y escribe el fichero con los resultados en el directorio de trabajo. Es con ese fichero con el que se debe trabajar.
11. Observar que la salida tiene valores de índices de reacción que deben comentarse en el informe. Los significados de estos valores están en los materiales que se incluyen en el directorio donde se descargan estos programas.



UNIVERSIDAD DE LA HABANA

Orden de enlace π	$p_{\mu\nu} = \sum_{i=1}^N n_i c_{i\mu} c_{i\nu}$
Densidad electrónica π	$p_{\mu\mu} = \sum_{i=1}^N n_i c_{i\mu}^2$
Carga formal π	$q_{\mu} = e_{p_z}^- - p_{\mu\mu} = Z^{\pi} - p_{\mu\mu}$

12. El informe final debe prepararse en una sola cuartilla, como máximo, y comentarse toda la salida obtenida.

Luis A. Montero Cabrera