

Estudio teórico de los sistemas moleculares CH₅⁺, CH₅ y CH₅⁻. Energía y conformación geométrica de distintos estados estacionarios

Novoa Vide, Juan José

ADVERTIMENT. La consulta d'aquesta tesi queda condicionada a l'acceptació de les següents condicions d'ús: La difusió d'aquesta tesi per mitjà del servei TDX (www.tesisenxarxa.net) ha estat autoritzada pels titulars dels drets de propietat intel·lectual únicament per a usos privats emmarcats en activitats d'investigació i docència. No s'autoritza la seva reproducció amb finalitats de lucre ni la seva difusió i posada a disposició des d'un lloc aliè al servei TDX. No s'autoritza la presentació del seu contingut en una finestra o marc aliè a TDX (framing). Aquesta reserva de drets afecta tant al resum de presentació de la tesi com als seus continguts. En la utilització o cita de parts de la tesi és obligat indicar el nom de la persona autora.

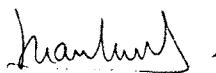
ADVERTENCIA. La consulta de esta tesis queda condicionada a la aceptación de las siguientes condiciones de uso: La difusión de esta tesis por medio del servicio TDR (www.tesisenred.net) ha sido autorizada por los titulares de los derechos de propiedad intelectual únicamente para usos privados enmarcados en actividades de investigación y docencia. No se autoriza su reproducción con finalidades de lucro ni su difusión y puesta a disposición desde un sitio ajeno al servicio TDR. No se autoriza la presentación de su contenido en una ventana o marco ajeno a TDR (framing). Esta reserva de derechos afecta tanto al resumen de presentación de la tesis como a sus contenidos. En la utilización o cita de partes de la tesis es obligado indicar el nombre de la persona autora.

WARNING. On having consulted this thesis you're accepting the following use conditions: Spreading this thesis by the TDX (www.tesisenxarxa.net) service has been authorized by the titular of the intellectual property rights only for private uses placed in investigation and teaching activities. Reproduction with lucrative aims is not authorized neither its spreading and availability from a site foreign to the TDX service. Introducing its content in a window or frame foreign to the TDX service is not authorized (framing). This rights affect to the presentation summary of the thesis as well as to its contents. In the using or citation of parts of the thesis it's obliged to indicate the name of the author.

UNIVERSIDAD DE BARCELONA

ESTUDIO TEORICO DE LOS SISTEMAS
MOLECULARES CH_5^+ , CH_5 Y CH_5^- .
ENERGIA Y CONFORMACION GEOMETRICA
DE DISTINTOS ESTADOS ESTACIONARIOS.

Memoria presentada para
optar al Grado de Doctor en
Ciencias Químicas por el
Licenciado
Juan José Novoa Vide



Barcelona, Junio de 1931

I. I N T R O D U C C I O N

El propósito de este trabajo, es presentar los resultados obtenidos al aplicar la Mecánica Cuántica al estudio de las moléculas de CH_5^+ , CH_5 y CH_5^- .

El interés de las mismas, reside en que constituyen los compuestos más sencillos no clásicos de carbono, por lo que su comportamiento será indicativo del que presentan los compuestos de carbono no clásicos de estructura más complicada. Al mismo tiempo, presentarán interés en cinética química, dado que su estructura será definitiva sobre la posibilidad de que la llamada inversión de Walden tenga o no lugar en determinados procesos. El interés experimental de las mismas, no es tan acusado como el que se deduce de su aplicación teórica. De hecho, sólo la molécula de CH_5^+ tiene existencia experimental como entidad estable aislada, aunque únicamente en condiciones ambientales poco frecuentes, como es el caso de la Resonancia de Ión Ciclotrón o el medio superácido.

La situación de estas moléculas dentro de los hidruros de carbono, se aprecia en la Figura I.1, donde se ha indicado el número de electrones de que consta cada miembro de la serie allí descrito. Es dicho número el que determina parte de las propiedades de dichas moléculas, ya que la de CH_5 , con un número impar de electrones, sólo podrá existir en estados electrónicos con capas abiertas, mientras que las otras dos, cuyo número es par, podrán existir en un estado singlete con

<u>5</u>	<u>6</u>	<u>7</u>	<u>8</u>	<u>9</u>	<u>10</u>
C(+)	CH(+)	CH ₂ (+)	CH ₃ (+)	CH ₄ (+)	CH ₅ (+)
C	CH	CH ₂	CH ₃	CH ₄	CH ₅
C(-)	CH(-)	CH ₂ (-)	CH ₃ (-)	CH ₄ (-)	CH ₅ (-)
<u>7</u>	<u>8</u>	<u>9</u>	<u>10</u>	<u>11</u>	<u>12</u>

← CLASSICOS →

← NO →

CLASSICOS

FIGURA I.1.- Los hidruros de carbono. Se agrupan según la carga y el número de electrones, que se indica con el número subrayado a los márgenes.

los orbitales moleculares llenos hasta determinado nivel por pares de electrones, es decir, con un estado en capas cerradas que, normalmente, será el fundamental. La importancia de este hecho, reside en que las moléculas con todos los orbitales ocupados llenos por un par de electrones, constituyen un caso, entre los posibles dentro del método Hartree-Fock, de fácil estudio y perfectamente descrito metodológicamente desde hace largo tiempo, mientras que el resto de los estados, conocidos como estados con capas abiertas, presentan una metodología para su tratamiento, en plena elaboración, y con problemas no resueltos. El estudio y desarrollo de los métodos aplicables para el conocimiento de la estructura de estas moléculas, constituye la primera parte del presente trabajo, desarrollándose dichos métodos en el siguiente capítulo. La aplicación de los mismos en forma de un programa de cálculo a partir de un formalismo elegido, constituye el siguiente, y en el último hemos descrito los cálculos realizados a partir del programa elaborado y otros que se indicarán. El resultado final está concretado en una serie de conclusiones químicas sobre estos sistemas.