Resonancia pi - sigma en el benceno

Nassiff, Jorge

1953

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Químicas de la Universidad de Buenos Aires

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

RESONANCIA π - σ EN EL BENCENO

Tesis para optar al Título de Dr. en Química

Sonia F. Jorge-Nassiff

-1953-

RESUMEN

Se calcula en este trabajo, la energía de resonancia del benceno, por el método de "ligaduras de valencia", derivado del de Heitler y London, introduciendo orbitales σ . Se muestra que una gran parte de la estabilidad de la molécula de benceno es debida a la interacción entre las ligaduras π -

La aplicación de los métodos de la mecánida cuántica al estado fundamental de una molécula diatómica permite obtener, teoricamente, la energía de disociación de la misma. Este resultado se consigue por el conocido método de Heitler y London, o cualquiera de sus sucesores.

En el caso de una molécula poliatómica, un tratamiento similar es teoricamente posible pero presenta enormes dificultades prácticas, para eludir las cuales, se introduce el concepto de resonancia.

En condiciones simplificatorias, el método de Heitler y London lleva a la siguiente expresion para la energía de disociación de la molécula de hidrógeno:

$$E = Q + n\epsilon$$

donde Q es una integral de Coulom, n un factor numérico y ϵ una integral de intercambio. En el caso del hidrógeno las integrales necesarias son calculables, de modo que la disociación puede determinarse en forma puramente teórica. En cambio pra una molécula poliatómica, si queremos usar el método derivado del de Heitler y London para este caso, llamado método de las ligaduras de valencia, hay que tener en cuenta que hay varias formas posibles de apreamiento de los electrones.

Ninguna de esas estructuras representa totalmente, como se pensaba en química clásica, el estado de la molécula. Cada una de ellas, sin embargo, contribuye con un cierto peso al estado total. Si además se aceptan ciertas simplificaciones, la energía de la molécula aparece dada por una expresión similar a la del hidrógeno, con las modificaciones apropiadas en el significado de los símbolos que en ella aparecen.

Ahora, consideremos nuestro caso: en él, la estabilidad del benceno está dada por el sistema de los electrones π y el de los σ. El tratamiento indicado nos conduce a la fórmula:

$$E = Q'' - 37,95$$

donde Q" es ahora un término coulombiano adicionado de un gran número de integrales de intercambio. En el estado actual de la química teórica el cálculo de Q" presenta dificultades insalvables. Por lo tanto, la energía de disociación del benceno no puede todavía calcularse. Para evitar esta dificultad se recurre a la siguiente observación: la energía de una (hipotética) estructura canónica como A (FIG. 6) está dada, mediante la aproximación del apareamiento perfecto, por la fórmula:

$$E = Q'' - 34,21$$

de acuerdo a nuestros resultados.

De aquí resulta que la energía R de la molécula de benceno referida a la extructura A que se halla dada por la diferencia, sea:

$$E = (37,95 - 43,21)\ e.V. = 3,74\ e.V.$$

Esta energía se denomina "energía de resonancia", e indica en cuanto la molécula de benceno es más estable que la estructura A. En esta forma nos queda una única incógnita que puede determinarse experimentalmente.

Hasta el presente, los cálculos en sistema conjugado han sido hechos usando la aproximación de Hückel (1931). Altmann hace una revisión de este concepto (Proc. Rey. Soc. A, volumen 210, 1951) cuando determina los niveles electrónicos en el etileno. Siguiendo el mismo camino introducimos aquí (como lo indicamos antes) estructuras canónicas hasta ahora consideradas despreciables; una estabilidad adicional aparece entonces debida a la resonancia π-σ (abreviación que usamos para indicar la resonancia entre electrones π y los del plano.)

Este nuevo efecto puede ser importante porque estas estructuras son numerosas y los valores de las integrales de intercambio π-σ, calculadas por Altmann, son bastantes grandes. La correlación entre las energías de reso

-nancia computada y observada muestra, sin embargo, que hay una cancelación parcial de errores. Se ha encontrado el error final en algunas décimas de e.V. como se esperaba. Se confirma entonces la validez de la aproximación cuando se computan energías de resonancia.

Se sugiere el cálculo de los estados excitados del benceno correspondientes a las otras representaciones que ya están explícitamente indicadas en este trabajo.-

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

RESONANCIA π - σ EN EL BENCENO

Tesis para optar al Título de Dr. en Química

Sonia F. Jorge-Nassiff

-1953-

SEELMANN-EGGEBER

Me hago un grato deber dejar constancia de mi agradecimiento al Dr. Simón L. Altmann por haberme sugerido el tema y guiádo durante la realización del mismo, así como también al Dr. José A. Balseiro por haber revisado el manuscrito y contribuído con acertadas sugerencias. Mi reconocimiento así mismo al Dr. Sadovsky y a la Sección Matemáticas de la Comisión Nacional de la Energía Atómica, especialmente a la Doctora M. Moujan Otaño por haber contribuído a la resolución del determinante.

INTRODUCCION

Se calcula en este trabajo, la energía de resonancia del benceno, por el método de "ligaduras de valencia", derivado del de Heitler y London, introduciendo orbitales σ . Se muestra que una gran parte de la estabilidad de la molécula de benceno es debida a la interacción entre las ligaduras $\pi - \sigma$. La aplicación de los métodos de la mecánica cuántica al estado fundamental de una molécula diatómica permite obtener, teóricamente, la energía de disociación de la misma. Este resultado se consigue por el conocido método de Heitler y London, o cualquiera de sus sucesores.
En el caso de una molécula poliatómica, un tratamiento similar es teóricamente posible pero presenta enormes dificultades prácticas, para eludir las cuales, se introduce el concepto de resonancia.
En condiciones simplificatorias, el método de Heitler y London lleva a la siguiente expresión para la energía de disociación de la molécula de hidrógeno:

$$E = Q + n\varepsilon$$

donde Q es una integral de Coulomb, n un factor numérico y ε una integral de intercambio. En el caso del hidrógeno las integrales necesarias son calculables, de modo que la disociación puede determinarse en forma puramente teórica.
En cambio para una molécula poliatómica, si queremos usar el método derivado del de Heitler y London para este caso, llamado método de las ligaduras de valencia, hay que tener en cuenta que hay varias formas posibles de apareamiento de los electrones, que representamos en la Fig. 5.
Ninguna de esas estructuras representa totalmente, como se pensaba en química clásica, el estado de la molécula. Cada una de ellas, sin embargo, contribuye con un cierto peso al estado total. Matemáticamente querría decir, que si se hace corresponder una función de onda $\varphi_A, \varphi_B, \dots\dots\dots \varphi_X$, a cada una de las llamadas estructuras canónicas de la Fig. 6, la función de onda total del sistema se puede escribir:

$$\Phi = c_A \varphi_A + c_B \varphi_B + \cdots\cdots + c_x \varphi_x$$

donde las c son coeficientes numéricos. Estos se determinan mediante el método de variación de Ritz (Pauling y Wilson, Introd. to Quantum Mechanics, pag. 186). Este método da directamente la configuración de estados para la cual la energía total es mínima, y en consecuencia, para esta configuración la estructura es la más estable de todas las posibles. Si además se aceptan ciertas simplificaciones, la energía de la molécula aparece dada por una expresión similar a la del hidrógeno, con las modificaciones apropiadas en el significado de los símbolos que en ella aparecen. Este razonamiento corresponde fisicamente a una aplicación del principio de superposición de estados. Esto permite desarrollar la función de onda de un sistema en una combinación lineal de todas las autofunciones del mismo. Además, en el método de ligaduras de valencia, se introducen dos aproximaciones: la primera consiste en tomar las estructuras canónicas como autoestados de la molécula. La segunda en admitir que el subespacio funcional subtendido solamente por las funciones correspondientes a las estructuras covalentes, es suficientemente representativo. Consideremos ahora nuestro caso: en él, la establilidad del benceno está dada po el sistema de los electrones π y el de los σ, de modo que las estructuras canónicas son las dadas en la Fig. 5. El tratamiento indicado nos conduce a la fórmula:

$$E = Q'' - 37{,}95 \quad \text{(Pag. 64)}$$

donde Q" es ahora un término coulombiano adicionado de un gran número de integrales de intercambio.

En el estado actual de la química teórica el cálculo de Q" presenta dificultades insalvables. Por lo tanto, la energía de disociación del benceno no puede todavía calcularse. Para evitar esta dificultad se recurre a la siguiente observación. La energía de una (hipotética) estructura canónica como A (Fig.6), está dada, mediante la aproximación del apareamiento perfecto (Eyring, Walter y Kimball, pag. 248), por la fórmula:

$$E = Q'' - 34,21$$

de acuerdo a nuestros resultados. (Pag. 65)

De aquí resulta que, la energía R de la molécula de benceno referida a la estructura A, que se halla dada por la diferencia, sea:

$$E = (37,95 - 34,21)\,e.V. = 3,74\ e.V.\quad (Pag. 65)$$

Esta energía se denomina "energía de resonancia", e indica en cuanto la molécula de benceno es más estable que la estructura A. En esta forma nos queda una única incógnita que puede determinarse experimentalmente.

Hasta el presente, los cálculos en sistemas conjugados, han sido hechos usando la aproximación de Hückel (1931). La forma en que dicha aproximación era considerada se entiende,(como lo hace notar Altmann) citando a Pauling y Wheland (1933): "Nosotros despreciamos la energía de los electrones que forman el sistema de ligaduras simples en el plano y su interacción con los electrones que ocupan las órbitas p. puras (estas cantidades de energía actúan en la misma forma en todas las estructuras canónicas consideradas, conduciéndonos por lo tanto, a unicamente un cambio en el cero de energía arbitrariamente elegido) y consideramos unicamente la energía de interacción en los últimos electrones, los cuales pueden interaccionar en [illegible] diferentes formas. Es decir, trataremos el benceno simplemente como un problema de seis electrones."

Altmann hace una revisión de este concepto (Proc. Roy.Soc.A,volumen 210 1951) cuando determina los niveles electrónicos en el etileno.

Siguiendo el mismo camino introducimos aquí (como lo indicamos antes), estructuras canónicas hasta ahora consideradas despreciables; una estabilidad adicional aparece entonces debida a la resonancia π-σ (abreviación que usamos para indicar la resonancia entre electrones π y los del plano).

Este nuevo efecto puede ser importante porque estas estructuras son numerosas y los valores de las integrales de intercambio π-σ, calculados por Altmann, son bastante grandes. La correlación entre las energías de resonancia computada y observada muestra, sin embargo, que hay una cancelación parcial de errores. Se ha encontrado el error final en algunas décimas deeV, como se esperaba. Se confirma entonces la validez de la aproximación cuando se computan energías de resonancia.

Se sugiere el cálculo de los estados excitados del benceno correspondientes a las otras representaciones que ya están explicitamente indicadas en este trabajo.-

----

NOTACIÓN

La notación para los electrones en el diagrama de Rumer se indica en la fig. 1. Los orbitales híbridos en el plano serán designados por σ , los orbitales perpendiculares 2p por π y los orbitales hidrógeno 1s por h. Los núcleos se indican con letras mayúsculas, los orbitales con la letra minúscula del núcleo correspondiente seguida, si es necesario, por un número, de acuerdo a lo indicado en la fig. 2.

Al escribir el Hamiltoniano, m, n y M, N, son índices genéricos para electrón y núcleo de hidrógeno respectivamente. Las sumatorias hasta M deben entenderse como sumas para los seis núcleos hidrógeno y una convención análoga vale para una sumatoria hasta m. Una comilla sobre el signo de sumatoria nos indica que el mismo término de repulsión electrónica no debe ser tomado dos veces.

La integral de intercambio entre dos electrones -π , $\varepsilon_{\pi\pi}$, está dada por:

$$\varepsilon_{\pi\pi} = \int \pi_A(a)\pi_B(b)\sigma_A(a_1)\sigma'_A(a_2)\sigma''(a_3)\sigma_h(b_1)\sigma'_b(b_2)\sigma''_b(b_3)h_{A'}(a_h)h_B(b_h)$$
$$H\pi_B(a)\pi_A(b)\sigma_A(a_1)\sigma'_A(a_2)\sigma''(a_3)\sigma_b(b_1)\sigma'_b(b_2)\sigma''_b(b_3)\,d\tau$$

y las otras integrales de intercambio son similarmente definidas. Aquí $d\tau$ es el elemento de volumen en el espacio de configuración de todos los electrones.

El Hamiltoniano puede en general ser escrito, para el intercambio entre los electrones a_μ y b_ν , en la forma:

$$H = \frac{Z^2}{r_{ab}} + \frac{4Z}{r_{AA'}} + \frac{4Z}{r_{AB'}} + \frac{2}{r_{A'B'}} + \frac{Z^2}{r_{AF}} + \frac{4Z}{r_{AF'}} + \frac{2}{r_{A'F'}} + \sum_i Ha_i + \sum_i Hb_i + \sum_i H_{f_i} +$$
$$+ \sum_m H_m + \sum_{ij} \frac{1}{r_{a_i,b_j}} + \sum_{i\neq\mu} \frac{1}{r_{a_\mu,a_i}} + \sum_{i\neq\nu} \frac{1}{r_{b_\nu,b_i}} + 2\sum_i \sum_m \frac{1}{r_{a_i,m}} - 2\sum_i \frac{Z}{r_{A,b_i}} -$$
$$-2\sum_m \frac{Z}{r_{A,m}} + \sum_m \sum_{n\neq m} \frac{1}{r_{m,n}} - 2\sum_M \sum_i \frac{1}{r_{M,\rho a_i}} - \sum_N \sum_{n\neq m} \frac{1}{r_{M,n}}$$

Usamos aquí unidades atómicas: unidad de longitud $a_0 = 0{,}5285\,\text{Å}$, unidad de carga e, carga del electrón.

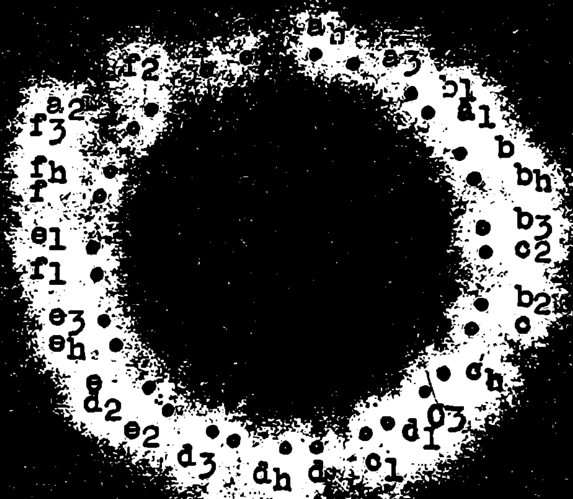


Fig. 1

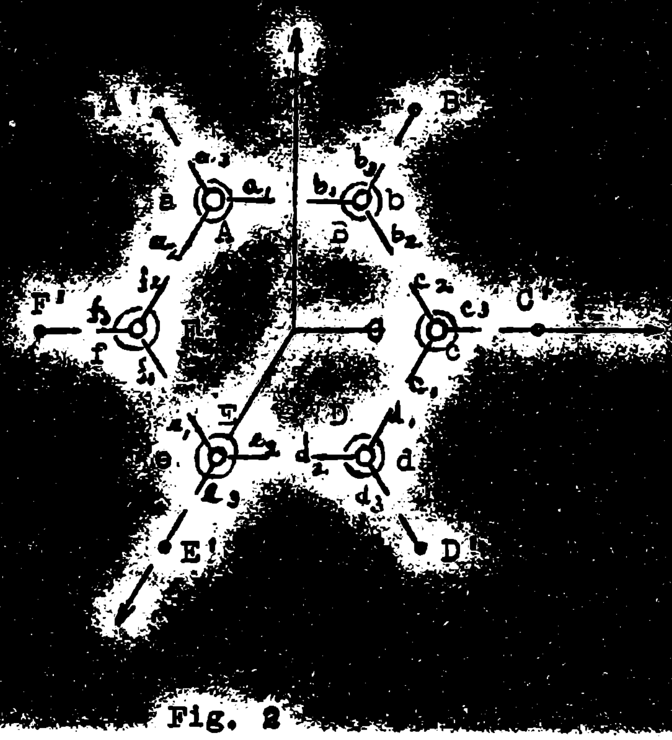


Fig. 2

La notación para los orbitales son los diagramados en las Fig. 3 y Fig. 4, donde los orbitales π están indicados con un punto en cada vértice del hexágono y los orbitales σ mediante una pequeña recta.
Cuando en la integral, dos orbitales pertenecen al mismo átomo de carbono, o el segundo orbital al átomo de hidrógeno correspondiente a ese carbono, se indica con un asterisco.*
Una comilla sobre el símbolo σ , significa que ese orbital descansa sobre la diagonal del exágono.

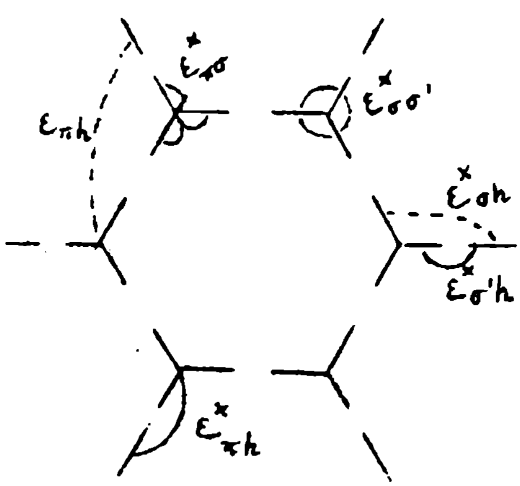


Fig. 3

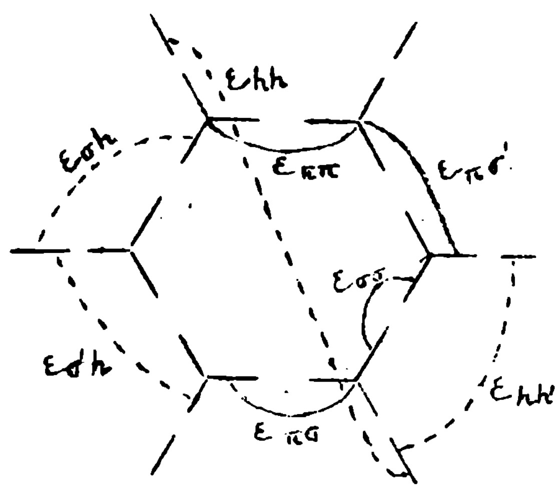


Fig. 4

METODO

Consideramos al benceno como una molécula plana, con los átomos de carbomo en los vértices de un hexágono regular, y con los ángulos C-C-C y C-C-H iguales a 120°. Tomando xy como el plano de la molécula podemos formar tres uniones de valencia del carbono con ángulos iguales a 120°, de la combinación apropiada de los orbitales del carbono: s, p_x, p_y. Esto permite que los seis orbitales p_z se coloquen uno en cada vértice del carbono.

Los electrones s, p_x, p_y del carbono, y los electrones del hidrógeno se consideran en orbitales σ , y los electrones p_z del carbono en orbitales π .

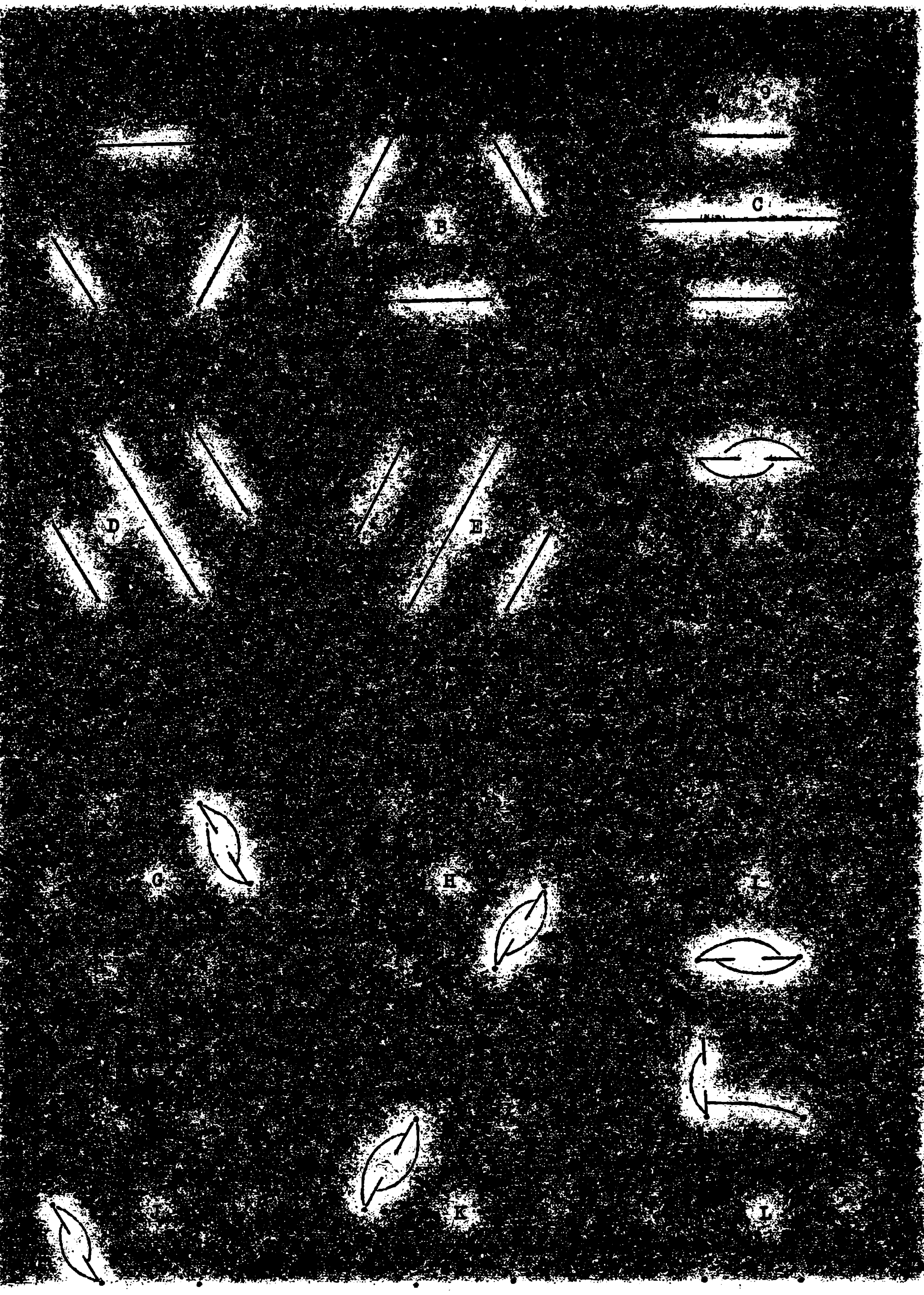
Las funciones propias independientes, correspondientes al número máximo de uniones que se consideran en este trabajo, son las indicadas en la fig. 5.

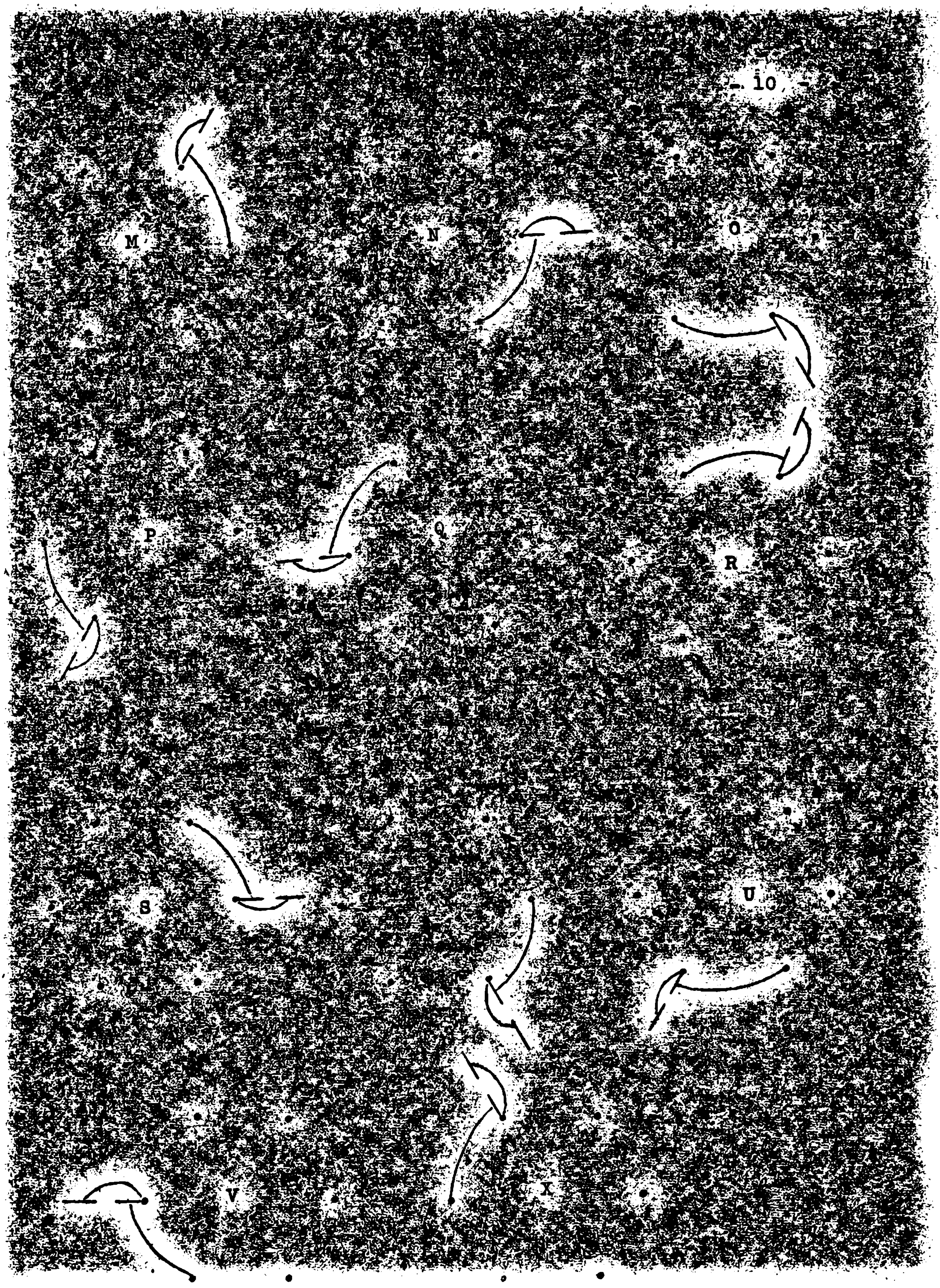
Ninguna de estas estructuras representa totalmente, como se pensaba en química clásica, el estado de la molécula. Cada una de ellas contribuye con un cierto peso al estado total.

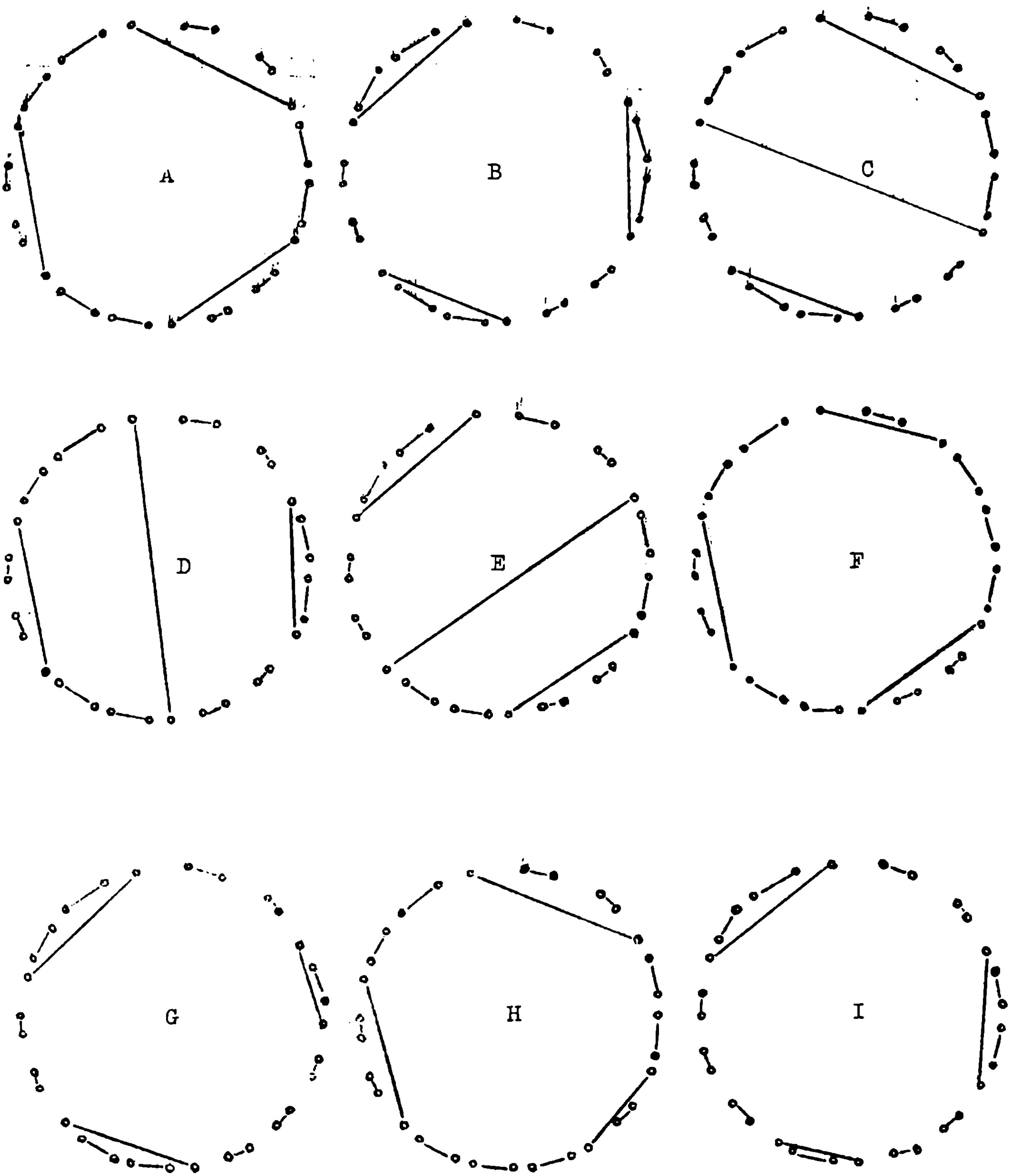
Las estructuras canónicas correspondientes pueden ser representadas por medio del diagrama de Rumer (1932), que se basa en la teoría de los invariantes binarios de Teller y Weyl (Fig.6). Estos diagramas tienen ciertas propiedades particulares que simplifican su construcción, esto es, que la disposición de los orbitales en ellos no guarda ninguna relación con los de la molécula real, y que dos "uniones" del diagrama (pero no necesariamente dos ligaduras reales de la molécula) no deben cruzarse. Las estructuras difieren una de otra por el apareamiento diferente de los electrones.

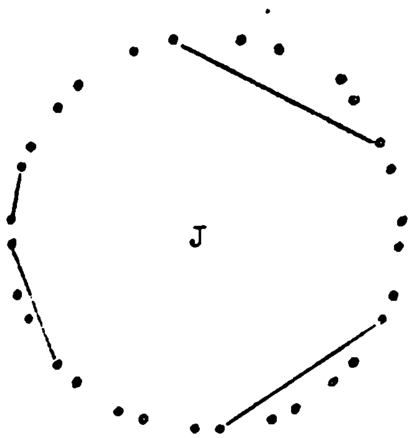
La estructura canónica A es la considerada en la aproximación del apareamiento perfecto.

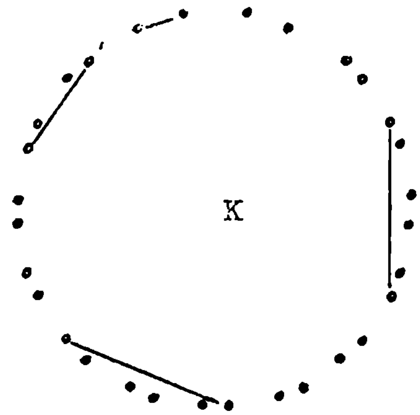
Como nosotros consideramos unicamente las estructuras correspondientes

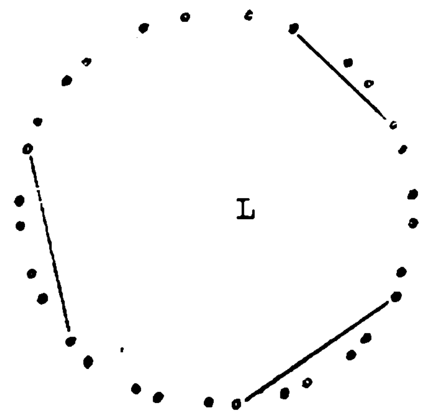

B
C
D
E
G
H
I
K
L

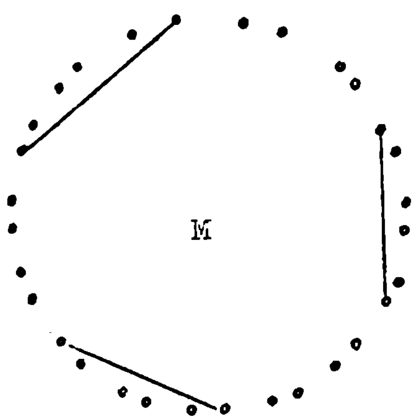

M
N
O
P
Q
R
S
U
V
X

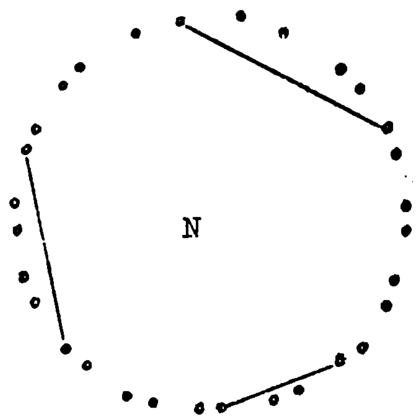

A
B
C
D
E
F
G
H
I

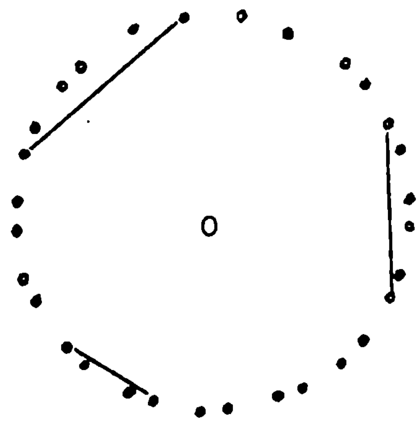

J

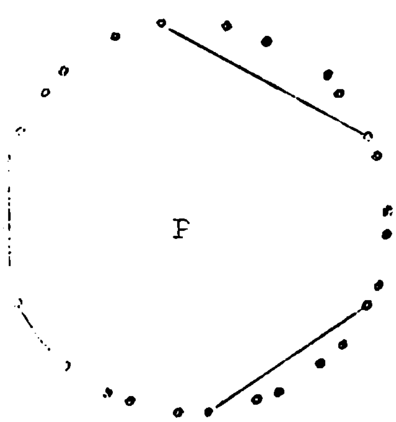

K

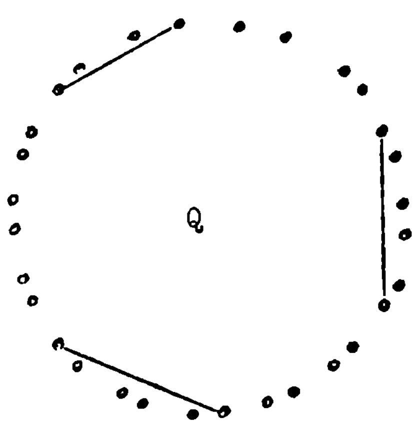

L

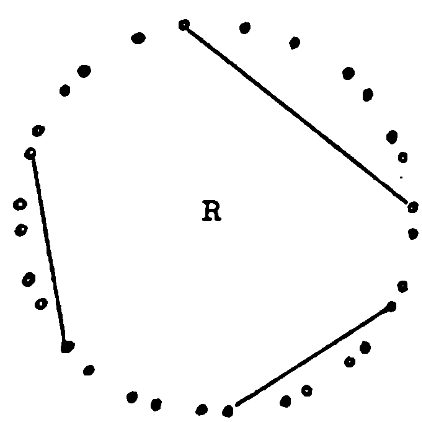

M


N


O


P


Q


R

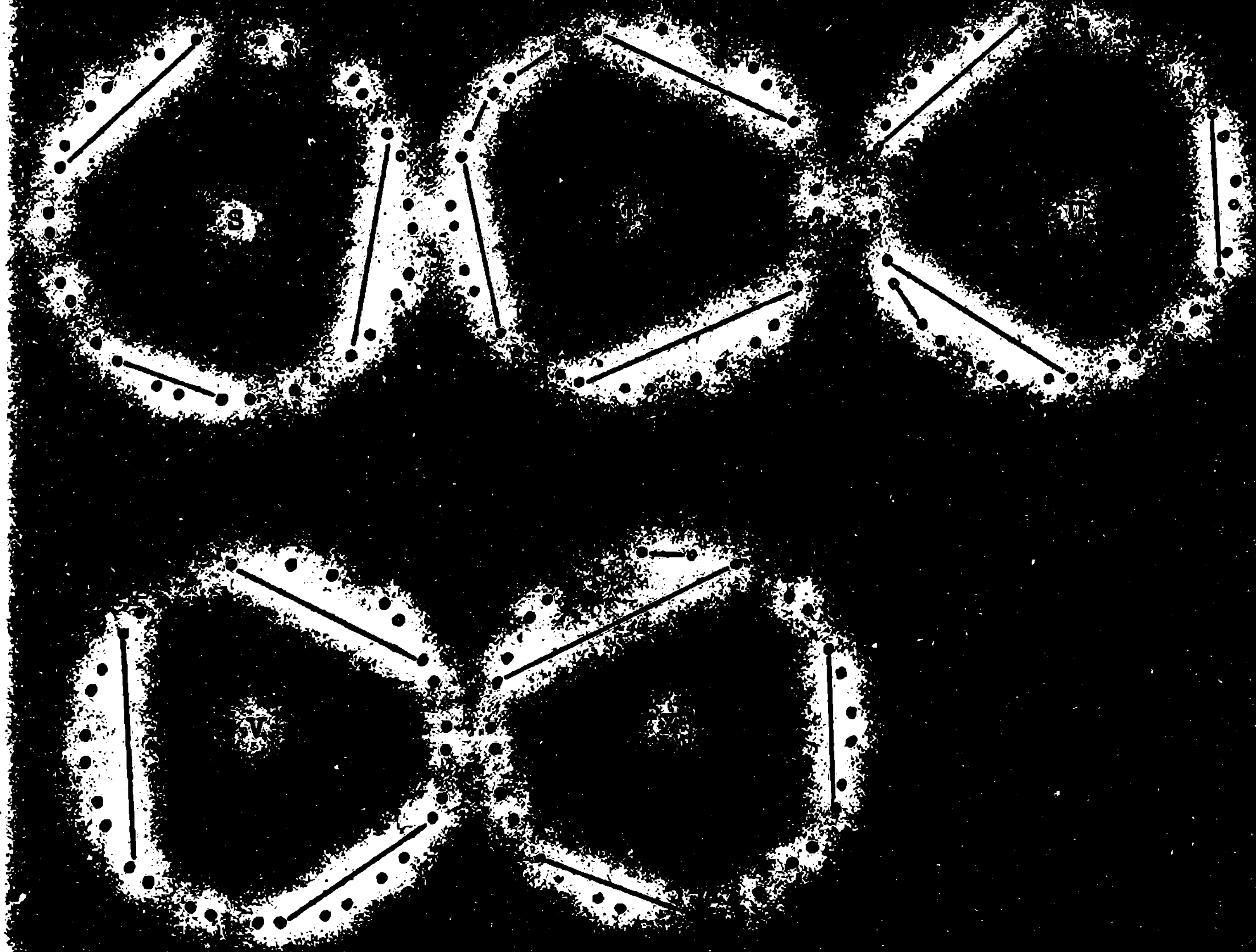


Fig.

al número máximo de uniones, la función de onda final usada para describir el sistema será una autofunción de S_z y S^2, correspondiendo el autovalor (eingenvalor) cero para S^2, esto es, dando los estados simples de la molécula.- S es aquí el operador momento angular de spin.-

La teoría de los grupos es útil aquí para factorizar el determinante secular debido a la existencia de simetría en la molécula de benceno.- El benceno pertenece al grupo de simetría $D_{6h} = D_6 x\ i$; podemos usar directamente el grupo D_6 pues la operación i no conduce a nuevos resultados.- Esto es debido a la siguiente circunstancia: para cada estructura canónica, sea A, consideramos una función de onda, sea ψ_A, la cual es una combinación lineal de funciones de onda del determinante, las que envuelven orbitales atómicos.- La operación de inversión es ahora, en nuestro caso, equivalente a una rotación de 180° alrededor del eje exagonal, C_2, seguido por una reflexión en el plano de la molécula.- La última deja invariante los orbitales atómicos del plano y cambia el signo de los orbitales π Como estos aparecen siempre por pares, el determinante y por lo tanto la función de onda canónica, son invariantes bajo reflexión en el plano de la molécula.-

Es decir, la operación inversión no dará nuevos resultados comparada con la C_2.- Un argumento análogo es válido para las otras operaciones del grupo.-

La reducción a los ejes principales conduce a un sistema de ecuaciones homogéneas cuya condición de compatibilidad es que el determinante: (pag. 25 y 64)

$$\begin{vmatrix} H_{11} - S_{11}E & H_{12} - S_{12}E & \cdots & H_{1n} - S_{1n}E \\ H_{21} - S_{21}E & H_{22} - S_{22}E & \cdots & H_{2n} - S_{2n}E \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ H_{n1} - S_{n1}E & H_{n2} - S_{n2}E & \cdots & H_{nn} - S_{nn}E \end{vmatrix} = 0$$

se anule, y cuyas raíces dan el espectro de energías.

Aquí:

$$H_{12} = \int \psi_1^* \mathbf{H} \psi_2 \, d\tau \; ; \; S_{12} = \int \psi_1^* \mathbf{H} \psi_2 \, d\tau$$

En la tabla 2 presentamos los resultados de la aplicación de las operaciones de este grupo a las 23 funciones propias, las cuales han sido indicadas con las letras A, B, C, D, ...y X en lugar de $\psi_A, \psi_B, \ldots \psi_X$

En esta tabla C_2 significa una rotación de 180° alrededor del eje de simetría exagonal; C_3^+ es una rotación de +120°, etc; $C_2'(a)$ es una rotación alrededor de un eje de simetría que pasa por el átomo "a"; c"(ab) es una rotación alrededor de un eje de simetría perpendicular a ab, etc.

		E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3C_2'$	$3C_2''$
Γ_1	A_1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	A_2	1	1	1	1	-1	-1
Γ_3	B_1	1	-1	1	-1	1	-1
Γ_4	B_2	1	-1	1	-1	-1	1
Γ_5	E_1	2	2	-1	-1	0	0
Γ_6	E_2	2	-2	-1	1	0	0
	ψ	23	3	2	0	1	5

TABLA 1

	E	C_2	C_3^+	C_3^-	C_6^+	C_6^-	$C_2'(a)$	$C_2'(b)$	$C_2'(c)$	$C_2''(ab)$	$C_2''(bc)$	$C_2''(cd)$
A	A	B	A	A	B	B	B	B	B	A	A	A
B	B	A	B	B	A	A	A	A	A	B	B	B
C	C	C	E	D	D	E	E	D	C	C	E	D
D	D	D	C	E	E	C	D	C	E	E	D	C
E	E	E	D	C	C	D	C	E	D	D	C	E
F	F	I	H	J	G	K	K	G	I	F	H	J
G	G	J	I	K	H	F	J	F	H	K	G	I
H	H	K	J	F	I	G	I	K	G	J	F	H
I	I	F	K	G	J	H	H	J	F	I	K	G
J	J	G	F	H	K	I	G	I	K	H	J	F
K	K	H	G	I	F	J	F	H	J	G	I	K
L	L	O	N	P	M	Q	X	S	U	R	T	V
M	M	P	O	Q	N	L	V	R	T	X	S	U
N	N	Q	P	L	O	M	U	X	S	V	R	T
O	O	L	M	Q	P	N	T	V	R	U	X	S
P	P	M	L	N	Q	O	S	U	X	T	V	R
Q	Q	N	M	O	L	P	R	T	V	S	U	X
R	R	U	T	V	S	X	Q	M	O	L	N	P
S	S	V	U	X	T	R	P	L	N	Q	M	O
T	T	X	V	R	U	S	O	Q	M	P	L	N
U	U	R	X	S	V	T	N	P	L	O	Q	M
V	V	S	R	T	X	U	M	O	Q	N	P	L
X	X	T	S	U	R	V	L	N	P	M	O	Q
$\chi(\psi)$	23	3	2	2	0	0	1	1	1	5	5	5

TABLA 2

El caracter de la representación que tiene estas autofunciones como funciones de base está dada en la tabla 1, la cual contiene los caracteres de las representaciones irreducibles del grupo.

$\chi(\psi)$ fué directamente determinada de los resultados dados en la tabla 2. El número de veces que las representaciones irreductibles Γ_i están contenidas en la representación reducible se obtiene de la fórmula de Eyring, Walter y Kimball (1949, p. 184):

$$a_i = \frac{1}{h} \sum_R \chi(R)\, \chi_i(R)$$

donde h es el orden del grupo,

$\chi(R)$ los caracteres de lasrepresentaciones reducibles

$\chi_i(R)$ " " " " " irreducibles

Luego será entondes:

$$\Gamma_{(\gamma)} = 4\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + 3\Gamma_4 + 4\Gamma_5 + 3\Gamma_6$$

Por medio de la ecuación 10.45 de Eyring, Walter y Kimball (1949, pag, 189):

$$\sum_R \chi_i\ (R)\ RA$$

encontramos las combinaciones lineales apropiadas de la serie de funciones que serán las bases para esas representaciones irreducibles.

Las varias sumatorias de interés están dadas en las tablas 3-4-5-6-7-8; de manera que las combinaciones lineales que son bases para las representaciones irreducibles del grupo serán las de la tabla 9.

$\sum_R \chi_1 (R)\ R\ A = 6\ (A + B)$

$\sum_R \chi_1(R)\ R\ B = 6\ (A + B)$

$\sum_R \chi_1(R)\ R\ C = 4\ (C + D + E)$

$\sum_R \chi_1(R)\ R\ D = 4\ (C + D + E)$

$\sum_R \chi_1(R)\ R\ E = 4\ (C + D + E)$

$\sum_R \chi_1(R)\ R\ F = 2\ (F + I + H + J + G + K)$

$\sum_R \chi_1(R)\ R\ G = 2\ (F + G + H + I + J + K)$

$\sum_R \chi_1(R)\ R\ H = 2\ (F + G + H + I + J + K)$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, I = 2\,(F + G + H + I + J + K)$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, J = 2\,(J + G + K + I) + F + 3\,H$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, K = 2\,(J + H + K + F) + G + 3\,I$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, L = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, M = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, N = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, O = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, P = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, Q = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, R = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, S = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, T = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, U = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, V = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

$$\sum_R X_1 (R)\, R\, X = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X$$

Tabla 3

$$
\begin{aligned}
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, A = 0\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, B = 0\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, C = 0\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, D = 0\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, E = 0\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, F = 0\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, G = 0\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, H = 0\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, I = 0\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, J = 0\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, K = 0\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, L = L + M + N + O + P + Q - R - S - T - U - V - X\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, M = L + M + N + O + P + Q - R - S - T - U - V - X\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, N = L + M + N + O + P + Q - R - S - T - U - V - X\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, O = L + M + N + O + P + Q - R - S - T - U - V - X\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, P = L + M + N + O + P + Q - R - S - T - U - V - X\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, Q = L + M + N + O + P + Q - R - S - T - U - V - X\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, R = -L - M - N - O - P - Q + R + S + T + U + V + X\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, S = -L - M - N - O - P - Q + R + S + T + U + V + X\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, T = -L - M - N - O - P - Q + R + S + T + U + V + X\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, U = -L - M - N - O - P - Q + R + S + T + U + V + X\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, V = -L - M - N - O - P - Q + R + S + T + U + V + X\\
&\sum_R \chi_2(R)\, R\, X = -L - M - N - O - P - Q + R + S + T + U + V + X
\end{aligned}
$$

Tabla 4

$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, A = 0$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, B = 0$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, C = 0$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, D = 0$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, E = 0$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, F = 0$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, G = 0$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, H = 0$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, I = 0$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, J = 0$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, K = 0$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, L = L - M + N - O + P - Q - R + S - T + U - V + X$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, M = -L + M - N + O - P + Q + R - S + T - U + V - X$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, N = +L - M + N - O + P - Q - R + S - T + U - V + X$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, O = -L + M - N + O - P + Q + R - S + T - U + V - X$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, P = +L - M + N - O + P - Q - R + S - T + U - V + X$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, Q = -L + M - N + O - P + Q + R - S + T - U + V - X$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, R = -L + M - N + O - P + Q + R - S + T - U + V - X$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, S = +L - M + N - O + P - Q - R + S - T + U - V + X$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, T = -L + M - N + O - P + Q + R - S + T - U + V - X$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, U = +L - M + N - O + P - Q - R + S - T + U - V + X$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, V = +L - M + N - O + P - Q - R + S - T + U - V + X$$
$$\sum_R \chi_3(R)\, R\, X = +L - M + N - O + P - Q - R + S - T + U - V + X$$

Tabla 5

$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; A = 6\;(A - B)$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; B = 6\;(B - A)$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; C = 0$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; D = 0$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; E = 0$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; F = 2(F + H + J) - 2(G + I + K)$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; G = 2(G + I + K) - 2(F + I + K)$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; H = 2(F + H + J) - 2(G + I + K)$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; I = 2(G + I + K) - 2(F + H + J)$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; J = 2(F + H + J) - 2(G + I + K)$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; K = 2(G + I + K) - 2(F + H + J)$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; L = L - M + N - O + P - Q + R - S + T - U + V - X$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; M = - L + M - N + O - P + Q - R + S - T + U - V + X$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; N = + L - M \quad N - O \quad P - Q \quad R - S \quad T - U \quad V - X$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; O = - L + M - N + O - P + Q - R + S - T + U - V + X$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; P = + L - M + N - O + P - Q + R - S + T - U + V - X$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; Q = - L + M - N + O - P + Q - R + S - T + U - V + X$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; R = + L - M + N - O + P - Q + R - S + T - U + V - X$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; S = - L + M - N + O - P + Q - R + S - T + U - V + X$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; T = + L - M + N - O + P - Q + R - S + T - U + V - X$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; U = - L + M - N + O - P + Q - R + S - T + U - V + X$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; V = + L - M + N - O + P - Q + R - S + T - U + V - X$$
$$\sum_R \chi_4(R)\; R\; X = - L + M - N + O - P + Q - R + S - T + U - V + X$$

Tabla 6

$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, A = 0$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, B = 0$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, C = 4C - 2(D + E)$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, D = 4D - 2(C + E)$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, E = 4E - 2(C + D)$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, F = 2F + 2I - G - H - J - K$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, G = 2G + 2J - H - I - K - F$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, H = 2H + 2K - I - J - F - G$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, I = 2I + 2F - J - K - G - H$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, J = 2J + 2G - F - H - K - I$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, K = 2K + 2H - G - I - F - J$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, L = 2L + 2O - M - N - P - Q$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, M = 2M + 2P - N - O - Q - L$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, N = 2N + 2Q - O - P - L - M$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, O = 2O + 2L - P - Q - M - N$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, P = 2P + 2M - Q - L - N - O$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, Q = 2Q + 2N - L - M - O - P$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, R = 2R + 2U - S - T - V - X$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, S = 2S + 2V - T - U - X - R$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, T = 2T + 2X - U - V - R - S$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, U = 2U + 2R - V - X - S - T$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, V = 2V + 2S - X - R - T - U$$
$$\sum_R \chi_r(R)\, R\, X = 2X + 2T - R - S - U - V$$

Tabla 7

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, A = 0$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, B = 0$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, C = 0$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, D = 0$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, E = 0$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, F = 2F - 2I - H - J + G + K$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, G = 2G - 2J - I - K + H + F$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, H = 2H - 2K - J - F + I + G$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, I = 2I - 2F - K - G + J + H$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, J = 2J - 2G - F - H + K + I$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, K = 2K - 2H - G - I + F + J$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, L = 2L - 2O - N - P + M + Q$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, M = 2M - 2P - O - Q + N + L$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, N = 2N - 2Q - P - L + O + M$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, O = 2O - 2L - Q - M + P + N$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, P = 2P - 2M - L - N + Q + O$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, Q = 2Q - 2N - M - O + L + P$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, R = 2R - 2U - T - V + S + X$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, S = 2S - 2V - U - X + T + R$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, T = 2T - 2X - V - T + U + S$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, U = 2U - 2R - X - S + V + T$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, V = 2V - 2S - R - T + X + U$$

$$\sum_R \chi_6(R)\; R\, X = 2X - 2T - S - U + R + V$$

Tabla 8

$$\Gamma_1 \left\{ \begin{array}{l} \psi_1 = A + B \\ \psi_2 = C + D + E \\ \psi_3 = F + G + H + I + J + K \\ \psi_4 = L + M + N + O + P + Q + R + S + T + U + V + X \end{array} \right.$$

$$\Gamma_2 \left\{ \psi_5 = L + M + N + O + P + Q - R - S - T - U - V - X \right.$$

$$\Gamma_3 \left\{ \psi_6 = L - M + N - O + P - Q - R + S - T + U - V + X \right.$$

$$\Gamma_4 \left\{ \begin{array}{l} \psi_7 = A - B \\ \psi_8 = F - G + H - I + J - K \\ \psi_9 = L - M + N - O + P - Q + R - S + T - U + V - X \end{array} \right.$$

$$\Gamma_5 \left\{ \begin{array}{l} \psi_{10} = C - D \\ \psi_{11} = D - E \\ \psi_{12} = F - G + I - J \\ \psi_{13} = G - H + J - K \\ \psi_{14} = L - M + O - P \\ \psi_{15} = M - N + P - Q \\ \psi_{16} = R - S + U - V \\ \psi_{17} = S - T + V - X \end{array} \right.$$

$$\Gamma_6 \left\{ \begin{array}{l} \psi_{18} = F + G - I - J \\ \psi_{19} = G + H - J - K \\ \psi_{20} = L + M - O - P \\ \psi_{21} = M + N - P - Q \\ \psi_{22} = R + S - U - V \\ \psi_{23} = S + T - V - X \end{array} \right.$$

Tabla 9

Ya que los elementos de matriz entre autofunciones pertenecientes a diferentes representaciones irreducibles del grupo desaparecen, tenemos el problema reducido, por este método, a la solución de un determinante de cuatro filas, dos de una fila, uno de tres, uno de ocho, y el último de seis (estos dos corresponden a funciones doblemente degeneradas, de manera que son en realidad dos de cuatro filas y dos de tres filas). Tabla 10.-

$$\begin{vmatrix} H_{11} - S_{11}E & H_{12} - S_{12}E & H_{13} - S_{13}E & H_{14} - S_{14}E \\ H_{12} - S_{12}E & H_{22} - S_{22}E & H_{23} - S_{23}E & H_{24} - S_{24}E \\ H_{13} - S_{13}E & H_{32} - S_{32}E & H_{33} - S_{33}E & H_{34} - S_{34}E \\ H_{14} - S_{14}E & H_{42} - S_{42}E & H_{43} - S_{43}E & H_{44} - S_{34}E \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} H_{55} - S_{55}E \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} H_{66} - S_{66}E \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} H_{77} - S_{77}E & H_{78} - S_{78}E & H_{79} - S_{79}E \\ H_{78} - S_{78}E & H_{88} - S_{88}E & H_{89} - S_{89}E \\ H_{79} - S_{79}E & H_{98} - S_{98}E & H_{99} - S_{99}E \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} H_{10\,10}-S_{10\,10}E & H_{10\,11}-S_{10\,11}E & H_{10\,12}-S_{10\,12}E & H_{10\,13}-S_{10\,13}E \\ H_{10\,11}-S_{10\,11}E & H_{11\,11}-S_{11\,11}E & H_{11\,12}-S_{11\,12}E & H_{11\,13}-S_{11\,13}E \\ H_{10\,12}-S_{10\,12}E & H_{12\,11}-S_{12\,11}E & H_{12\,12}-S_{12\,12}E & H_{12\,13}-S_{12\,13}E \\ H_{10\,13}-S_{10\,12}E & H_{13\,11}-S_{13\,11}E & H_{13\,12}-S_{13\,12}E & H_{13\,13}-S_{13\,13}E \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} H_{18\,18}-S_{18\,18}E & H_{18\,19}-S_{18\,19}E & H_{18\,20}-S_{18\,20}E & H_{18\,21}-S_{18\,21}E \\ H_{18\,19}-S_{18\,19}E & H_{19\,19}-S_{19\,19}E & H_{19\,20}-S_{19\,20}E & H_{19\,21}-S_{19\,21}E \\ H_{18\,20}-S_{18\,20}E & H_{20\,19}-S_{20\,19}E & H_{20\,20}-S_{20\,20}E & H_{20\,21}-S_{20\,21}E \end{vmatrix} = 0$$

Tabla 10

Nosotros trabajaremos exclusivamente con la primera representación, quedando las otras para algún trabajo posterior.-

Los elementos de matriz H_{12} y las integrales S_{12} están definidos por:

$$H_{12} = \int \psi_1^* H \psi_2 \, d\tau$$

$$S_{12} = \int \psi_1^* H \psi_2 \, d\tau$$

Las siguientes igualdades valen entre los elementos de matriz, las que fueron obtenidas de consideraciones de simetría y que, por otra parte, se observarán mas tarde:

$$H_{AA} = H_{BB}$$

$$H_{CC} = H_{DD} = H_{EE}$$

$$H_{CD} = H_{DE} = H_{CE}$$

$$H_{FF} = H_{GG} = H_{HH} = H_{II} = H_{JJ} = H_{KK}$$

$$H_{FG} = H_{FK}$$

$$H_{FH} = H_{FJ}$$

$$H_{LL} = H_{MM} = H_{NN} = H_{OO} = H_{PP} = H_{QQ} =$$

$$= H_{RR} = H_{SS} = H_{TT} = H_{UU} = H_{VV} = H_{XX}$$

$$H_{LO} = H_{RU}$$

$$H_{RS} = H_{RX}$$

$$H_{LP} = H_{LN}$$

$$H_{PR} = H_{LT}$$

$$H_{RT} = H_{RV}$$

$$H_{LQ} = H_{LM}$$

$$H_{QR} = H_{LS}$$

$$H_{OR} = H_{LU}$$

$$H_{MR} = H_{LX}$$

$$H_{NR} = H_{LV}$$

$$H_{AC} = H_{AD} = H_{AE} = H_{BC} = H_{BD} = H_{BE}$$

$$H_{AF} = H_{AH} = H_{AJ}$$

$$H_{AG} = H_{AI} = H_{AK}$$

$H_{BG} = H_{BH} = H_{BJ}$

$H_{AL} = H_{AN} = H_{AP}$

$H_{AM} = H_{AO} = H_{AQ}$

$H_{AR} = H_{AT} = H_{AV}$

$H_{AS} = H_{AU} = H_{AX}$

$H_{BL} = H_{BN} = H_{BP}$

$H_{BM} = H_{BO} = H_{BQ}$

$H_{BR} = H_{BT} = H_{BV}$

$H_{BS} = H_{BU} = H_{BX}$

$H_{CG} = H_{DF} = H_{EG}$; $H_{CF} = H_{DG}$; $H_{EI} = H_{CJ}$

$H_{CH} = H_{CK} = H_{DI} = H_{EJ}$; $H_{CI} = H_{DJ} = H_{EH} = H_{EK}$

$H_{DH} = H_{DK} = H_{EF}$

$H_{CL} = H_{CO}$; $H_{CM} = H_{CP}$; $H_{CN} = H_{CQ}$; $H_{CR} = H_{CU}$

$H_{CS} = H_{CV}$; $H_{CT} = H_{CX}$; $H_{DL} = H_{DO}$; $H_{DM} = H_{DP}$

$H_{DN} = H_{DQ}$; $H_{DR} = H_{DU}$; $H_{DS} = H_{DV}$; $H_{DT} = H_{DX}$

$H_{EL} = H_{EO}$; $H_{EM} = H_{EP}$; $H_{EN} = H_{EQ}$; $H_{ER} = H_{EU}$

$H_{ES} = H_{EV}$; $H_{ET} = H_{EX}$

$H_{FL} = H_{GM} = H_{HN} = H_{IO} = H_{JP} = H_{KQ}$

$H_{FM} = H_{GN} = H_{HO} = H_{IP} = H_{JQ} = H_{KR}$

$H_{FN} = H_{GO} = H_{HP} = H_{IQ} = H_{JR} = H_{KS}$

$H_{FO} = H_{GP} = H_{HQ} = H_{IR} = H_{JS} = H_{KJ}$

$H_{FP} = H_{GQ} = H_{HR} = H_{IS} = H_{JT} = H_{KU}$

$H_{FQ} = H_{GR} = H_{HS} = H_{IT} = H_{JU} = H_{KV}$

$H_{FR} = H_{GS} = H_{HT} = H_{IU} = H_{JV} = H_{KX}$

$H_{FS} = H_{GT} = H_{HU} = H_{IV} = H_{JX} = H_{KL}$

$H_{FT} = H_{GU} = H_{HV} = H_{IX} = H_{JL} = H_{KM}$

$H_{FU} = H_{GV} = H_{HX} = H_{IL} = H_{JM} = H_{KN}$

$H_{FV} = H_{GX} = H_{HL} = H_{IM} = H_{JN} = H_{KO}$

$H_{FX} = H_{GL} = H_{HM} = H_{IN} = H_{JO} = H_{KP}$

$$H_{11} = 2H_{AA} + 2H_{AB}$$

$$H_{22} = 3H_{CC} + 6H_{CD}$$

$$\begin{aligned}
H_{33} &= 6H_{FF} + 10H_{FG} + 8H_{FH} + 6H_{FI} + 4H_{FJ} + 2H_{FK} \\
&= 6H_{FF} + 12H_{FG} + 12H_{FH} + 6H_{FI}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{44} = {} & 6H_{LL} + 6H_{RR} + 10H_{LM} + 10H_{RS} \quad 2H_{QR} \\
& + 8H_{LN} + 4H_{PR} + 8H_{RT} \\
& + 6H_{LO} + 6H_{OR} + 6H_{RU} \\
& + 4H_{LP} + 8H_{NR} + 4H_{RV} \\
& + 2H_{LQ} + 10H_{MR} + 2H_{RX} \\
& + 12H_{LR} \\
& + 10H_{LS} \\
& + 8H_{LT} \\
& + 6H_{LU} \\
& + 4H_{LV} \\
& + 2H_{LX} \\
= {} & 12H_{LL} + 12H_{LM} + 12H_{RS} + 12H_{QR} + 12H_{LN} + \\
& + 12H_{PR} + 12H_{RT} + 12H_{LO} + 12H_{OR} + 12H_{NR} + \\
& + 12H_{MR} + 12H_{LR}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{12} &= H_{AC} + H_{AD} + H_{AE} + H_{BC} + H_{BD} + H_{BE} \\
&= 6H_{AC}
\end{aligned}$$

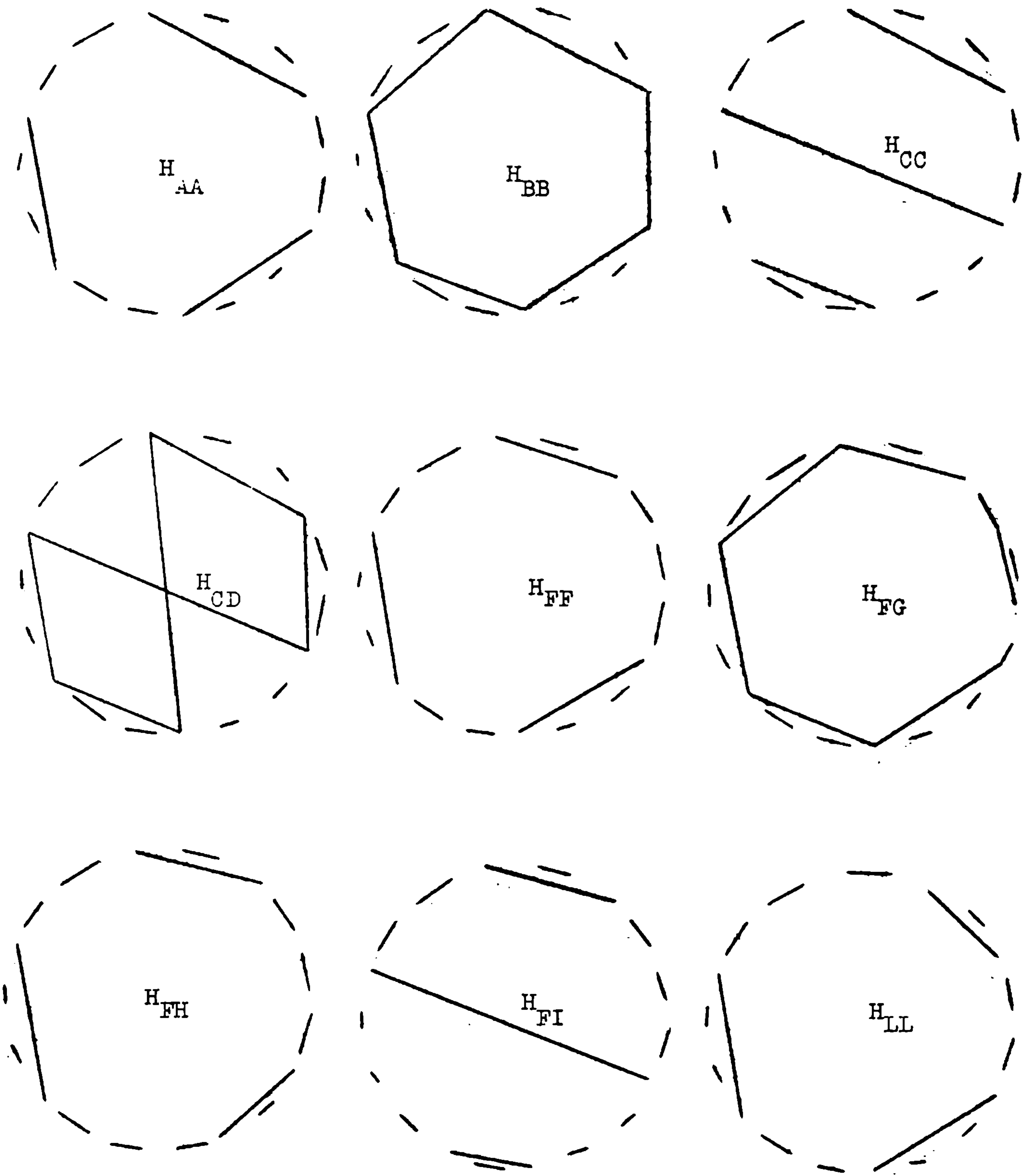
$$\begin{aligned}
H_{12} = {} & H_{AF} + H_{AG} + H_{AH} + H_{AI} + H_{AJ} + H_{AK} \\
& H_{BF} + H_{BG} + H_{BH} + H_{BI} + H_{BJ} + H_{BK} \\
= {} & 3H_{AF} + 3H_{AG} + 3H_{BF} + 3H_{BG}
\end{aligned}$$

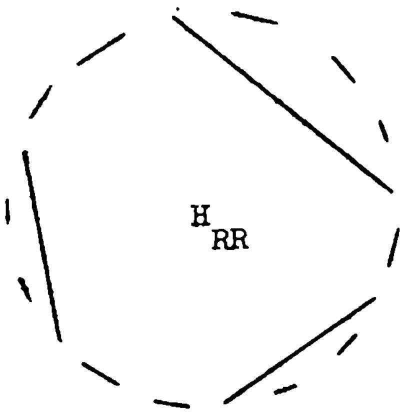
$$\begin{aligned}
H_{14} = {} & H_{AL} + H_{AM} + H_{AN} + H_{AO} + H_{AP} + H_{AQ} \\
& H_{AR} + H_{AS} + H_{AT} + H_{AU} + H_{AV} + H_{AX} \\
& H_{BL} + H_{BM} + H_{BN} + H_{BO} + H_{BP} + H_{BQ} \\
& H_{BR} + H_{BS} + H_{BT} + H_{BU} + H_{BV} + H_{BX} \\
= {} & 3H_{AL} + 3H_{AM} + 3H_{AR} + 3H_{AS} + 3H_{BL} + 3H_{BM} + 3H_{BR} + 3H_{BS}
\end{aligned}$$

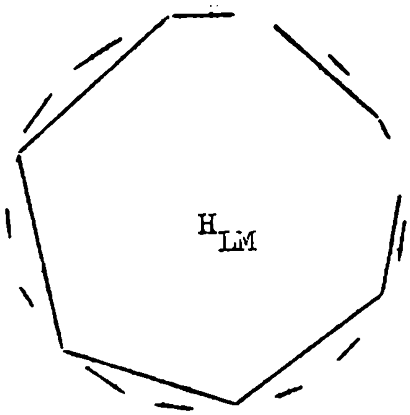
$$
\begin{aligned}
H_{23} = {} & H_{CF} + H_{CG} + H_{CH} + H_{CI} + H_{CJ} + H_{CK} + H_{DF} + H_{DG} + H_{BH} \\
& + H_{DI} + H_{DJ} + H_{DK} + H_{EF} + H_{EG} + H_{EH} + H_{EI} + H_{EJ} + H_{EK} \\
= {} & 2H_{CF} + 4H_{CG} + 4H_{DF} + 2H_{DG} + 4H_{EF} + 2H_{EH} \\
H_{24} = {} & H_{CL} + H_{CM} + H_{CN} + H_{CO} + H_{CP} + H_{CQ} + H_{OR} + H_{CS} + H_{CT} \\
& H_{CU} + H_{CV} + H_{CX} + H_{DL} + H_{DM} + H_{DN} + H_{DO} + H_{DP} + H_{DQ} \\
& H_{DR} + H_{DS} + H_{DT} + H_{DU} + H_{DV} + H_{DX} + H_{EL} + H_{EM} + H_{EN} \\
& H_{EO} + H_{EP} + H_{EQ} + H_{ER} + H_{ES} + H_{ET} + H_{EU} + H_{EV} + H_{EX} \\
= {} & 2H_{CL} + 2H_{CM} + 2H_{CN} + 2H_{CR} + 2H_{CS} + 2H_{CT} + 2H_{DL} + 2H_{DM} + 2H_{DN} \\
& 2H_{DR} + 2\,H_{DS} + 2H_{DT} + 2H_{EL} + 2H_{EM} + 2H_{EN} + 2H_{ER} + 2H_{ES} + 2H_{ET} \\
H_{34} = {} & H_{FL} + H_{FM} + H_{FN} + H_{FO} + H_{FP} + H_{FQ} + H_{FR} + H_{FS} + H_{FT} \\
& H_{FU} + H_{FV} + H_{FX} + H_{GL} + H_{GM} + H_{GN} + H_{GO} + H_{GP} + H_{GQ} \\
& H_{GR} + H_{GS} + H_{GT} + H_{GU} + H_{GV} + H_{GX} + H_{HL} + H_{HM} + H_{HN} \\
& H_{HO} + H_{HP} + H_{HQ} + H_{HR} + H_{HS} + H_{HT} + H_{HU} + H_{HV} + H_{HX} \\
& H_{IL} + H_{IM} + H_{IN} + H_{IO} + H_{IP} + H_{IQ} + H_{IR} + H_{IS} + H_{IT} \\
& H_{IU} + H_{IV} + H_{IX} + H_{JL} + H_{JM} + H_{JN} + H_{JO} + H_{JP} + H_{JQ} \\
& H_{JR} + H_{JS} + H_{JT} + H_{JU} + H_{JV} + H_{JX} + H_{KL} + H_{KM} + H_{KN} \\
& H_{KO} + H_{KP} + H_{KQ} + H_{KR} + H_{KS} + H_{KT} + H_{KU} + H_{KV} + H_{KX} \\
= {} & 6H_{FL} + 6H_{FM} + 6H_{FN} + 6H_{FO} + 6H_{FP} + 6H_{FQ} \\
& 6H_{FR} + 6H_{FS} + 6H_{FT} + 6H_{FU} + 6H_{FV} + 6H_{FX}
\end{aligned}
$$

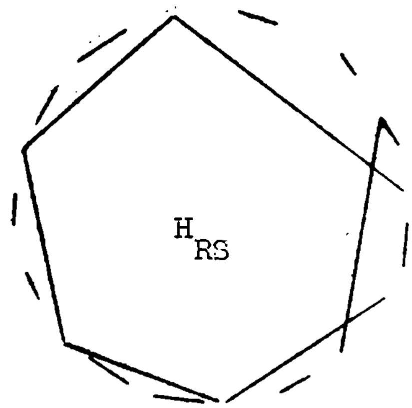
Por superposición de dos de los diagramas dados en la figura 6, obtenemos las "islas" de Pauling (Fig. 7) y con ellas los ciclos indicados en la Tabla 11, y para los cuales hay que tener en cuenta que dos electrones en cualquier unión deben tener spins opuestos.

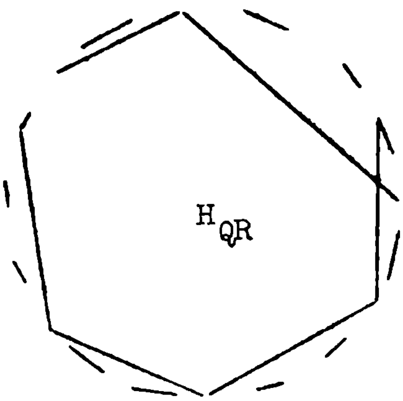
Los orbitales asociados con spin α se escriben encima de la linea horizontal y los con spin β debajo de la misma.

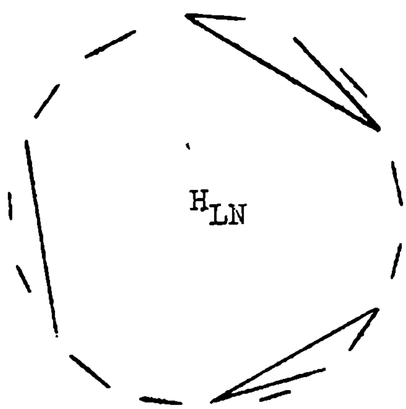

H_{AA}
H_{BB}
H_{CC}
H_{CD}
H_{FF}
H_{FG}
H_{FH}
H_{FI}
H_{LL}

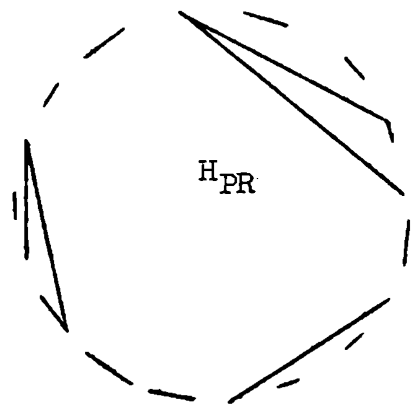

H_{RR}

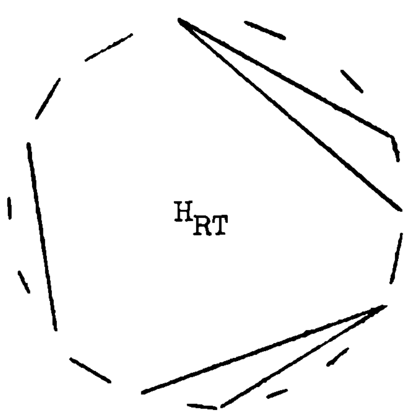

H_{LM}

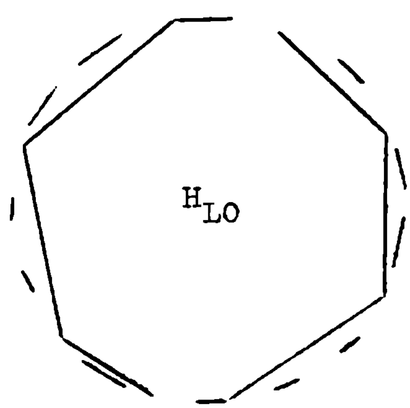

H_{RS}

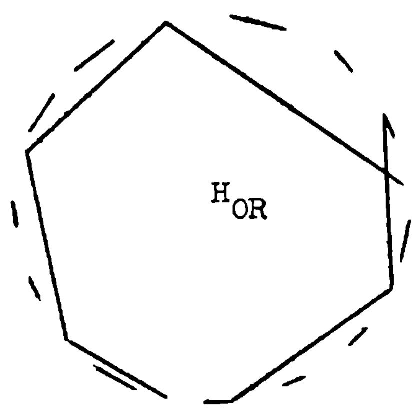

H_{QR}

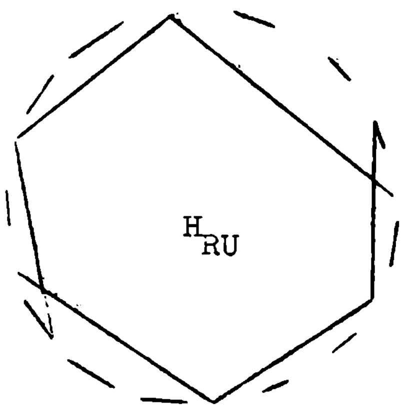

H_{LN}

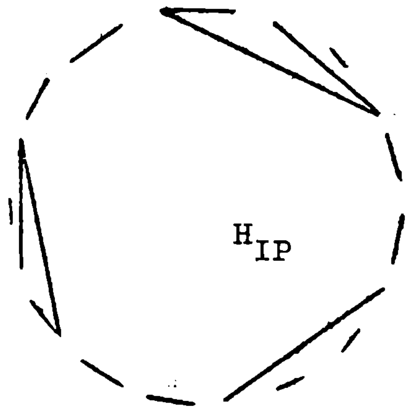

H_{PR}

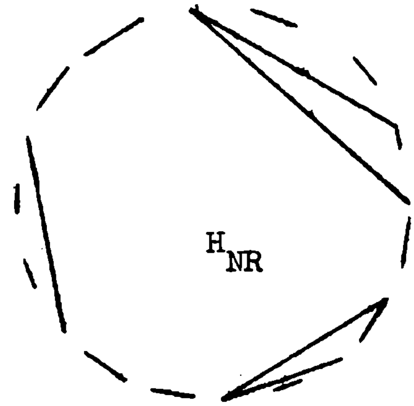

H_{RT}

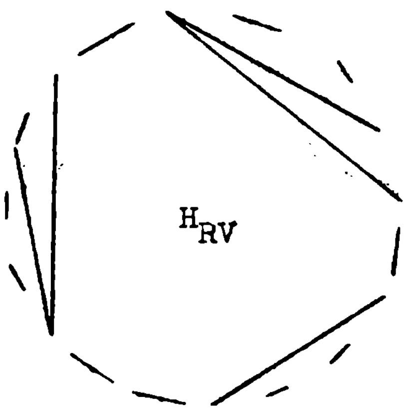

H_{LO}

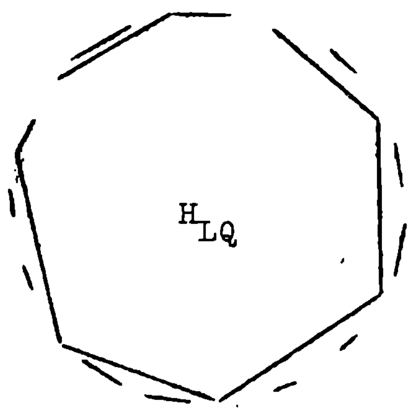

H_{OR}

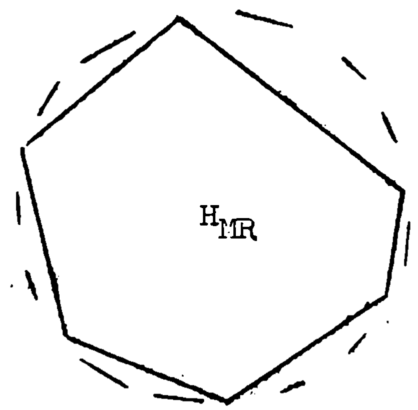

H_{RU}

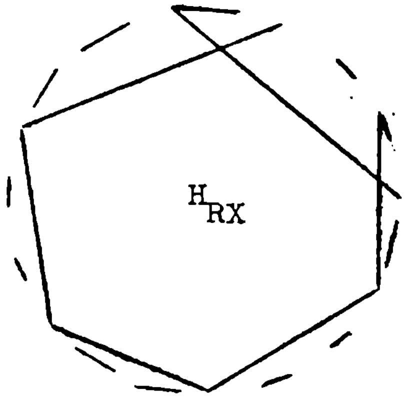

H_{IP}

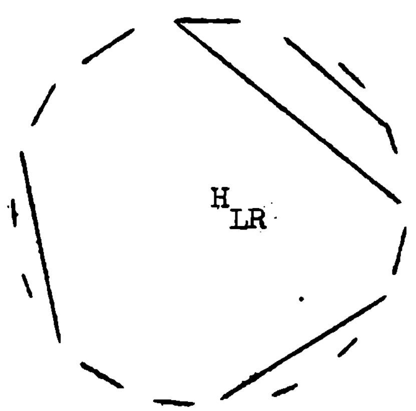

H_{NR}

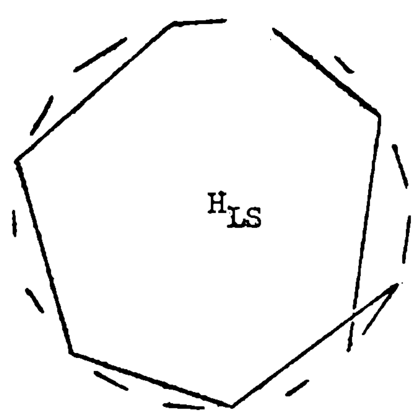

H_{RV}

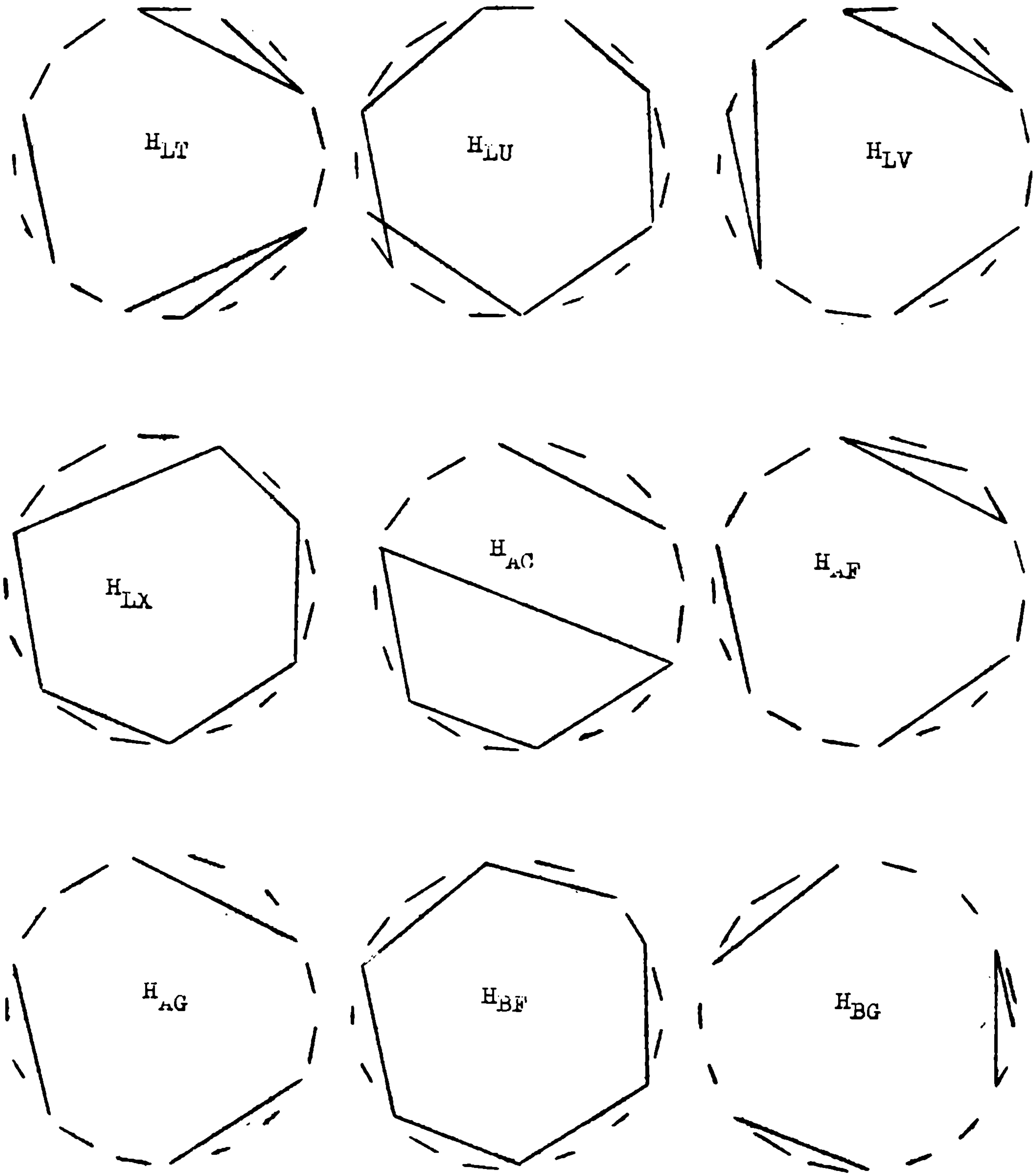

H_{LQ}

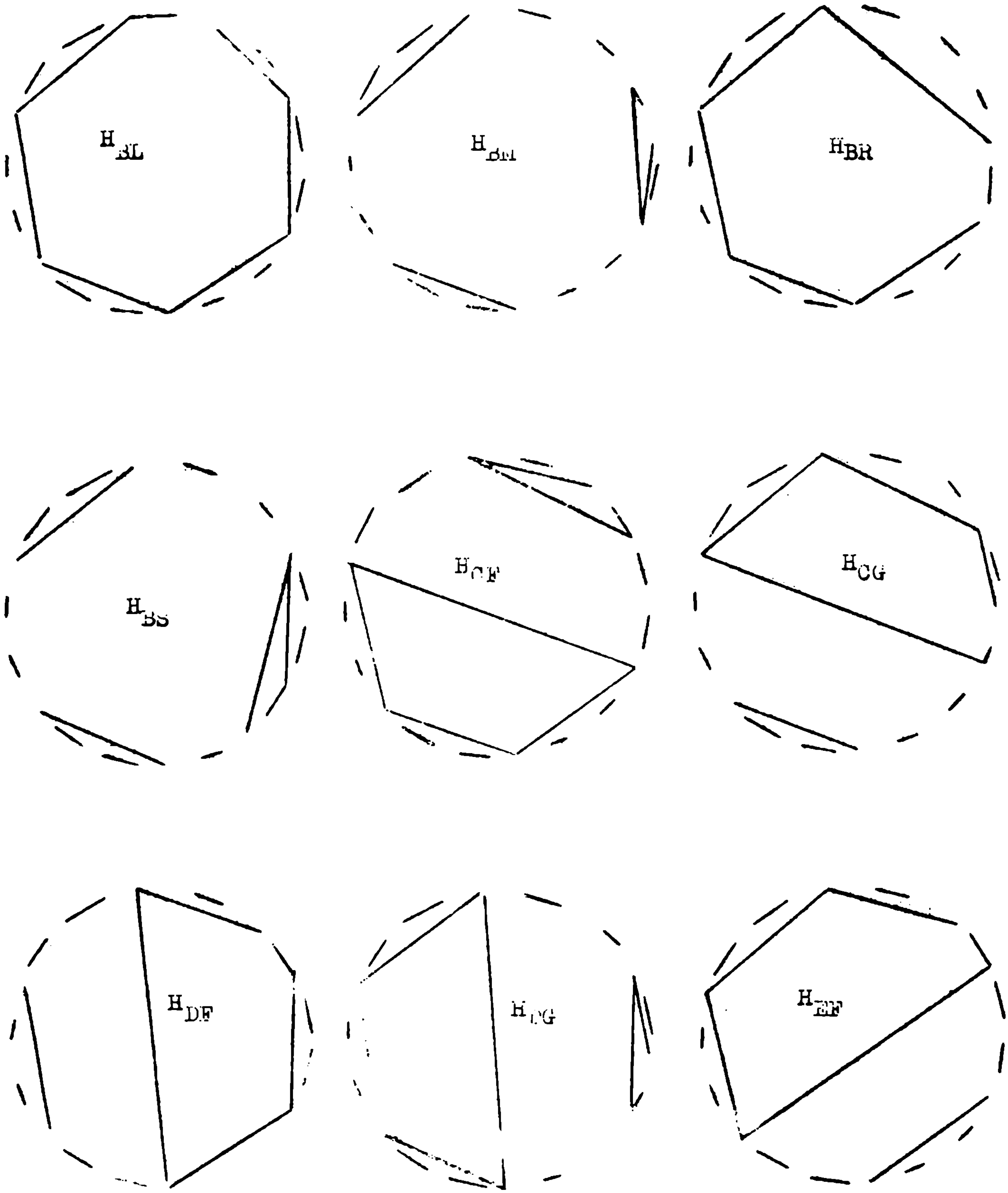

H_{MR}

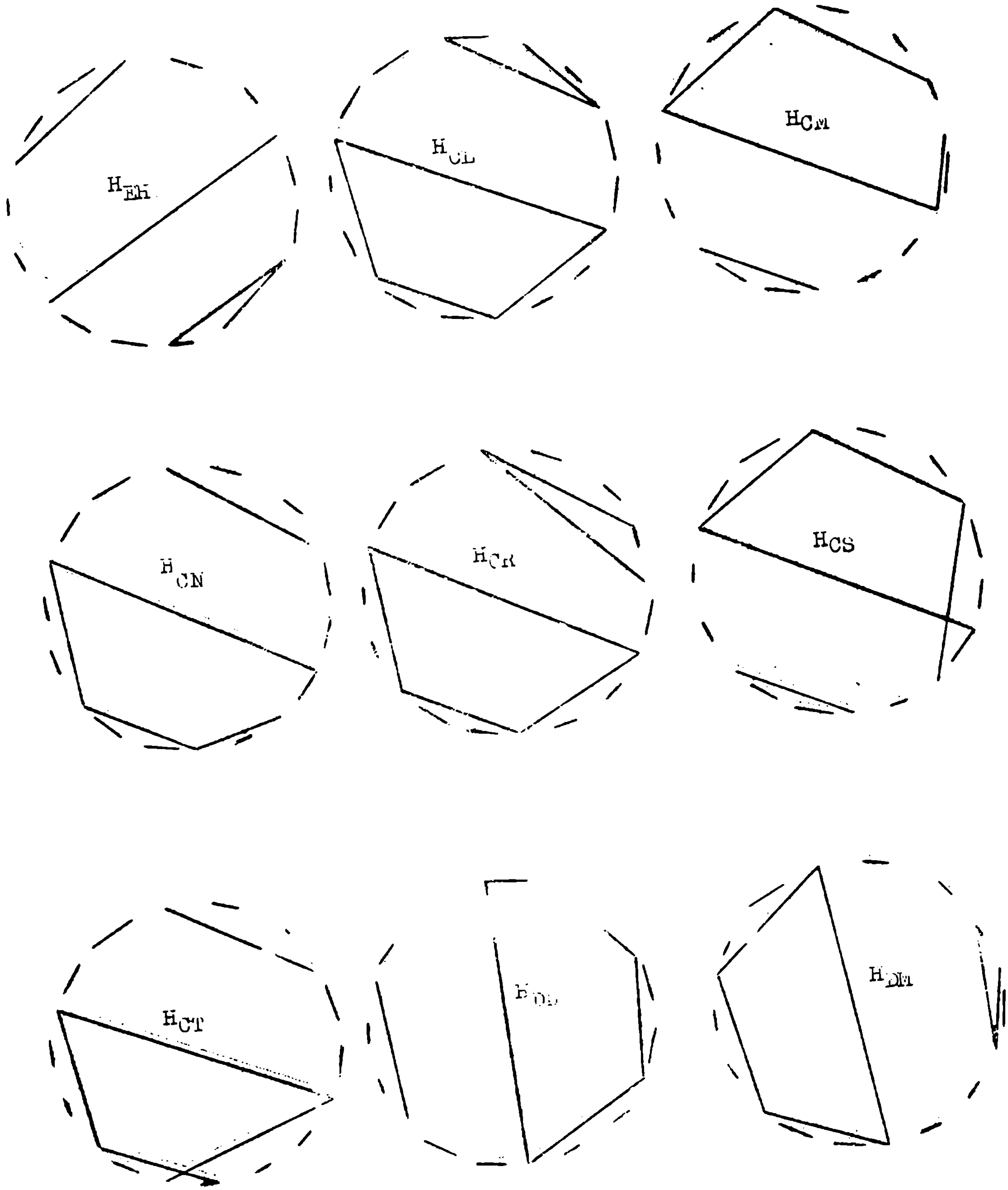

H_{RX}


H_{LR}

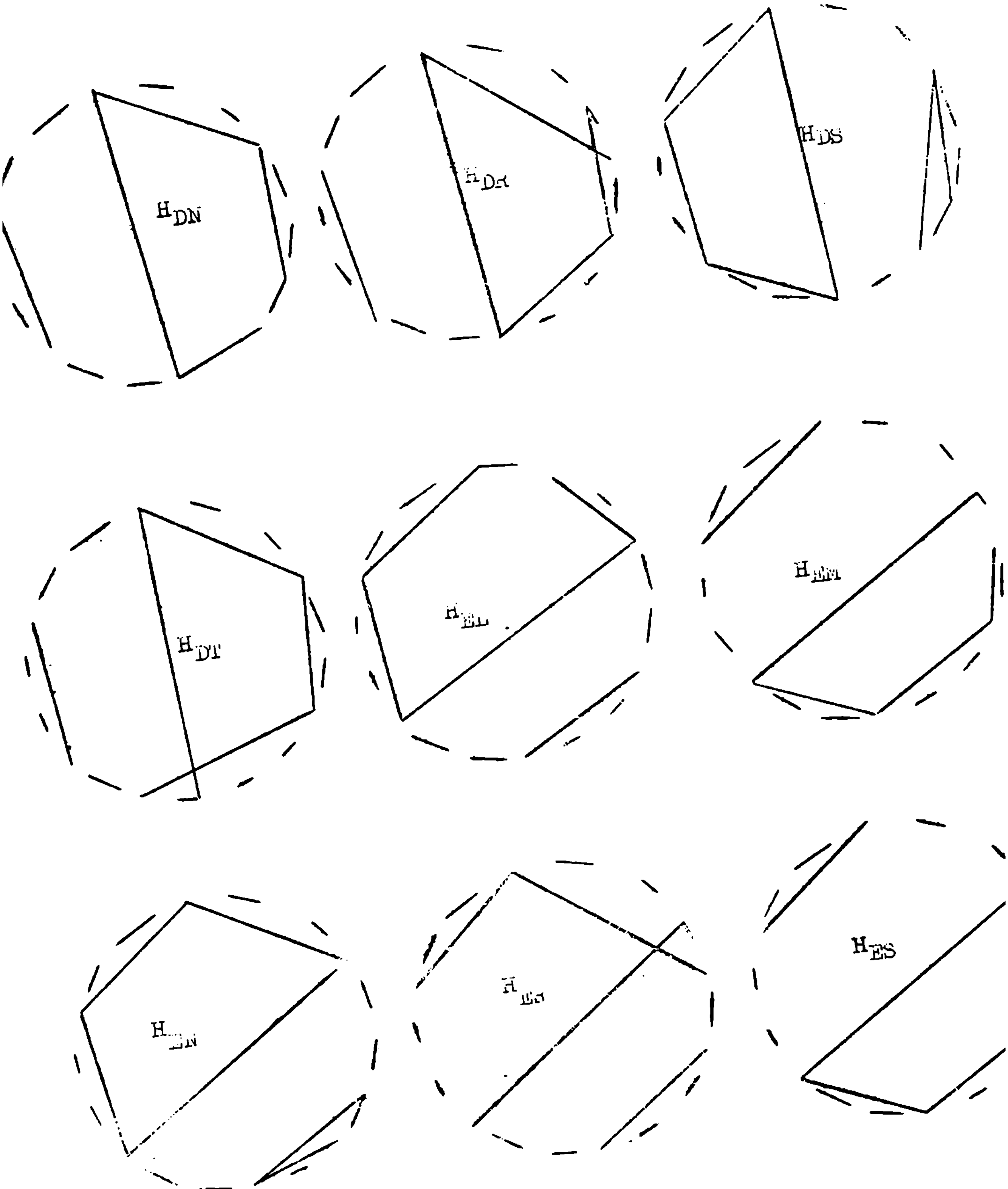

H_{LS}


H_{LT}
H_{LU}
H_{LV}
H_{LX}
H_{AC}
H_{AF}
H_{AG}
H_{BF}
H_{BG}

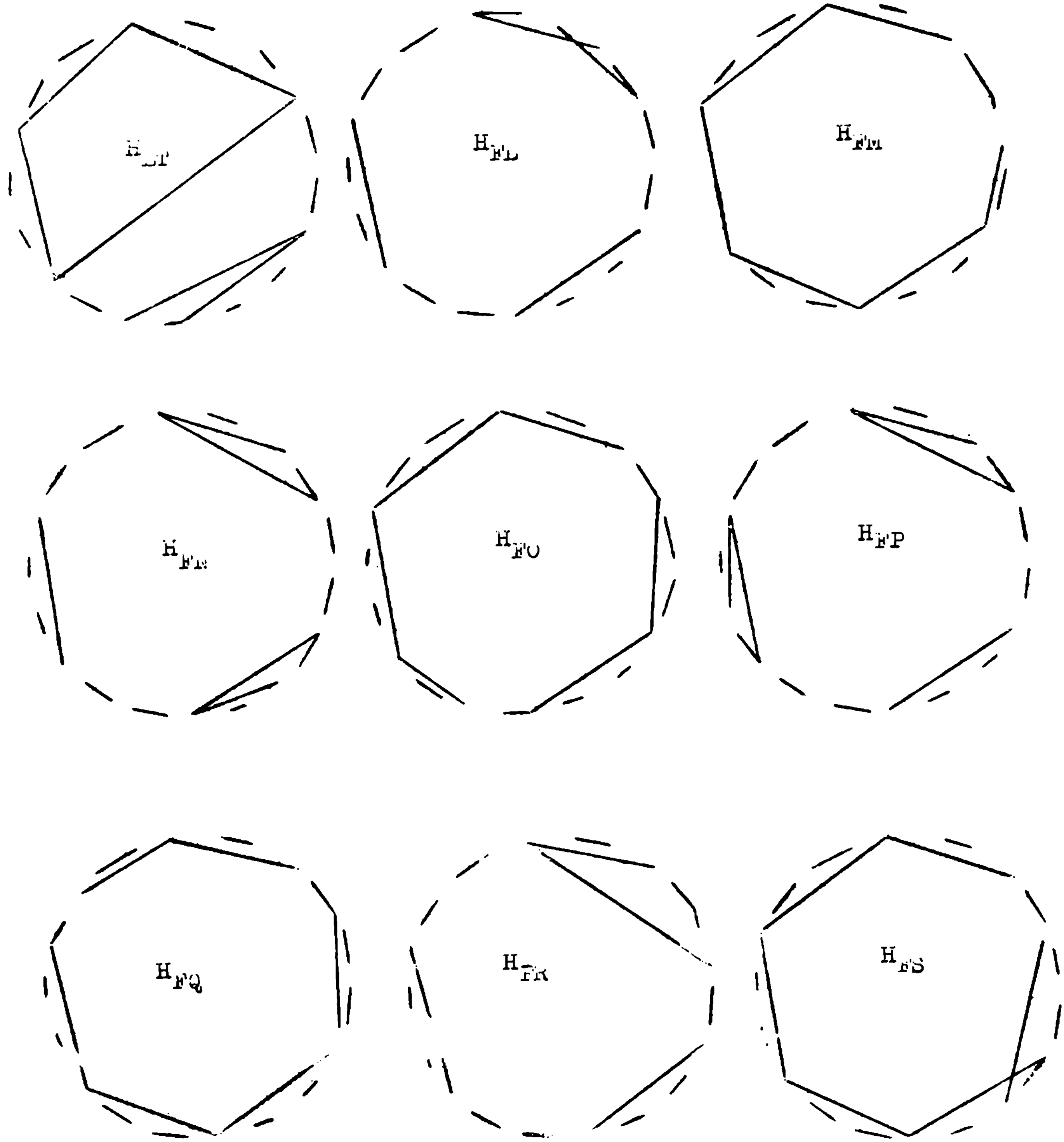

H_{BL}
H_{BR}
H_{BS}
H_{CF}
H_{CG}
H_{DF}
H_{EF}



H_{EH}
H_{CL}
H_{CM}
H_{CN}
H_{CR}
H_{CS}
H_{CT}
H_{DM}



H_{DN}
H_{DR}
H_{DS}
H_{DT}
H_{ES}



H_{FL}
H_{FM}
H_{FO}
H_{FP}
H_{FQ}
H_{FR}
H_{FS}

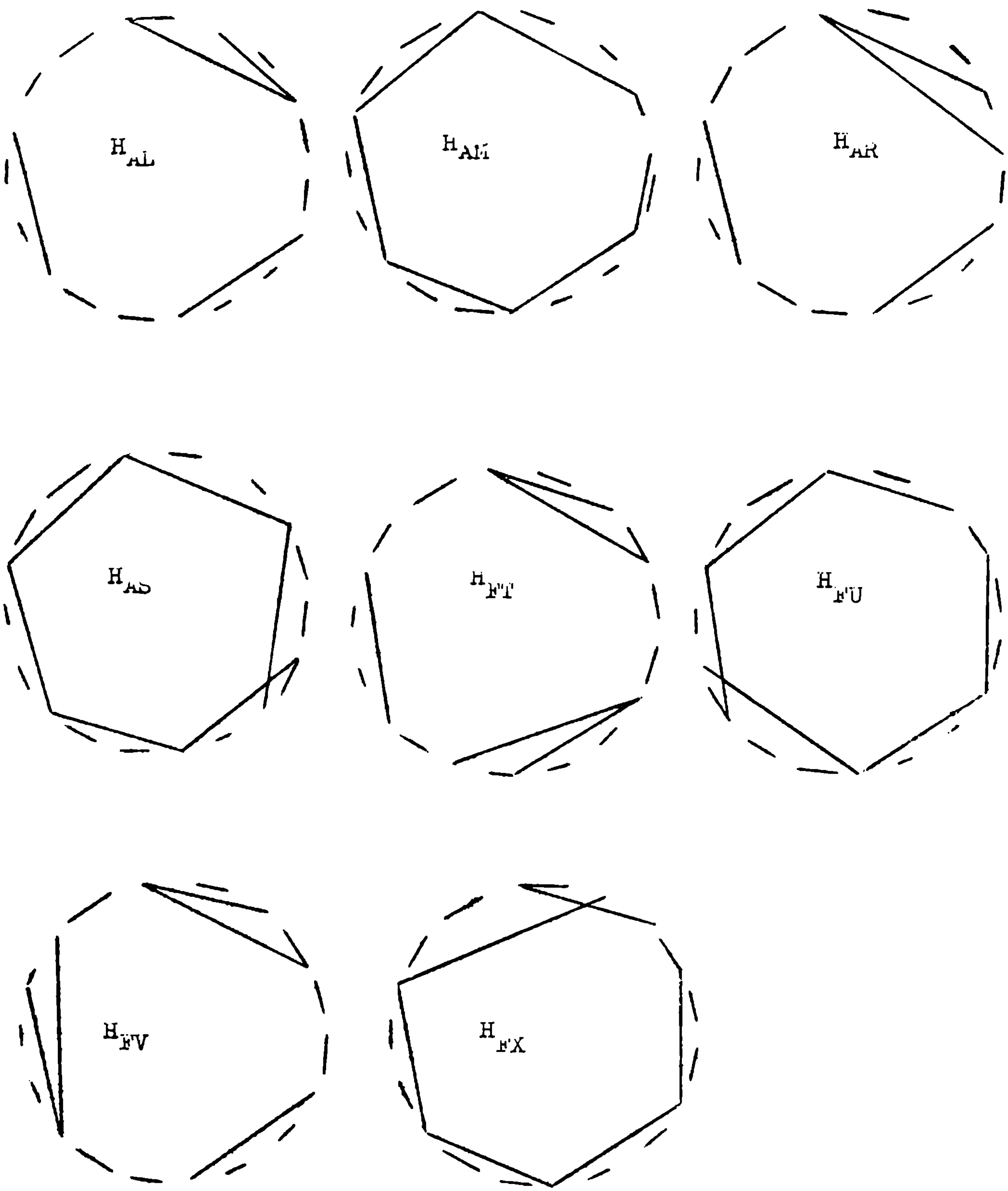


Fig. 7

$$H_{AA}=\left(\frac{a}{b}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{AB}=\left(\frac{a\ c\ e}{b\ d\ f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{CC}=\left(\frac{a}{b}\right)\left(\frac{c}{f}\right)\left(\frac{d}{e}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{CD}=\left(\frac{a\ c\ e}{b\ f\ d}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FF}=\left(\frac{a}{b_1}\right)\left(\frac{b}{a_1}\right)\left(\frac{f}{e}\right)\left(\frac{d}{c}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FG}=\left(\frac{a\ e\ c}{b_1 f d b_2}\right)\left(\frac{a_1 c_1}{b}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FH}=\left(\frac{a}{b_1}\right)\left(\frac{c}{d_1}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{d}{c_1}\right)\left(\frac{b}{a_1}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FI}=\left(\frac{a}{b_1}\right)\left(\frac{b}{a_1}\right)\left(\frac{c}{f}\right)\left(\frac{d}{e_2}\right)\left(\frac{e}{d_2}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{LL}=\left(\frac{a}{a_h}\right)\left(\frac{b}{a_3}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{RR}=\left(\frac{a}{b_3}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{b}{bh}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{a_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{LM}=\left(\frac{a\ e\ c}{a_h f d b_3}\right)\left(\frac{b_h a_3}{b}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{RS}=\left(\frac{b_3 f d c_h}{a\ e\ c}\right)\left(\frac{b_h c}{b}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{QR}=\left(\frac{b_3 f_3}{a}\right)\left(\frac{f_h e\ c\ b_h}{f\ d\ b}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{LN}=\left(\frac{a_h b}{a.a_3}\right)\left(\frac{c_h d}{c.c_3}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_1}{d_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{PR}=\left(\frac{b_h a}{b\ b_3}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e_3 e}{f\ e_h}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{RT}=\left(\frac{b_h a}{b\, b_3}\right)\left(\frac{d_h c}{d\ d_3}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{LO}=\left(\frac{a_h f\ d_3}{a\ e}\right)\left(\frac{a_3 c\ d_h}{b\ d}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{OR}=\left(\frac{b_3 f\ d_3}{a\ e}\right)\left(\frac{b_h c\ d_h}{b\ d}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{c_2}{f_2}\right)$$

$$H_{RU}=\left(\frac{b_3\ f\ e_h}{a\ e}\right)\left(\frac{b_h c\ e_3}{b\ d}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{c_1}{d_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{f_1}{a_1}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{LP}=\left(\frac{a_h b}{a.a_3}\right)\left(\frac{e_h f}{e\ e_3}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{c_1}{d_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{NR}=\left(\frac{b_h a}{b\ b_3}\right)\left(\frac{c_h\ d}{c\ c_3}\right)\left(\frac{f}{e}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_1}{d_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{RV}=\left(\frac{b_h a}{b\ b_3}\right)\left(\frac{f_3 f}{e\ f_h}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)\left(\frac{c}{d}\right)$$

$$H_{LQ}=\left(\frac{a_h f_3}{a}\right)\left(\frac{f_h e\ c\ a_3}{f\ d\ b}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{e_2}{f_2}\right)$$

$$H_{MR}=\left(\frac{a\ c\ e}{b_3 d\ f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b}{b_h}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{RX}=\left(\frac{a_3 e\ c\ b_h}{f\ d\ b}\right)\left(\frac{b_3 a_h}{a}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{LR}=\left(\frac{a_h b_3}{a}\right)\left(\frac{a_3 b_h}{b}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e}{f}\right)$$

$$H_{LS}=\left(\frac{a_h f\ d\ c_h}{a\ e\ c}\right)\left(\frac{a_3 c_3}{[illegible]}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{LT}=\left(\frac{a_h b}{a\ a}\right)\left(\frac{d_h e}{d\ d}\right)\left(\frac{f}{e}\right)\left(\frac{b_1}{a}\right)\left(\frac{b_h}{b}\right)\left(\frac{c_2}{b}\right)\left(\frac{c_h}{[illegible]}\right)\left(\frac{d_1}{c}\right)\left(\frac{e_2}{[illegible]}\right)\left(\frac{e_h}{[illegible]}\right)\left(\frac{f_1}{e}\right)\left(\frac{f_h}{f}\right)\left(\frac{a_2}{f}\right)$$

$$H_{LU}=\left(\frac{a_h f\ c_h}{a\ e}\right)\left(\frac{a_3 c\ e_3}{b\ d}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{LV}=\left(\frac{a_h b}{a\ a_3}\right)\left(\frac{f_3 f}{e\ f_h}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{LX}=\left(\frac{a}{a_h}\right)\left(\frac{a_3 e\ c}{f\ d\ b}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{a_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{AC}=\left(\frac{a}{b}\right)\left(\frac{f\ d}{e\ c}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_3}{f_h}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{AF}=\left(\frac{b_1 b}{a\ a_1}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{AG}=\left(\frac{a}{b}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{a_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{BF}=\left(\frac{b_1 f\ d\ b}{a\ e\ c\ a_1}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{BG}=\left(\frac{a}{f}\right)\left(\frac{c_2 c}{b\ b_2}\right)\left(\frac{d}{e}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{AL}=\left(\frac{a_h b}{a\ a}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{b_1}{a}\right)\left(\frac{b_h}{b}\right)\left(\frac{c_2}{\text{[illegible]}}\right)\left(\frac{c_h}{c}\right)\left(\frac{d_1}{c}\right)\left(\frac{d_h}{d}\right)\left(\frac{e_2}{d}\right)\left(\frac{e_h}{e}\right)\left(\frac{f_1}{e}\right)\left(\frac{f_h}{f}\right)\left(\frac{a_2}{f}\right)$$

$$H_{AM}=\left(\frac{b_h c\ e\ c}{b\ f\ d b_3}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{AR}=\left(\frac{a\ b_h}{b\ b_3}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{AS}=\left(\frac{c_3 a\ e\ c}{b\ f\ d\ c_h}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{BL}=\left(\frac{a\ f\ b\ d}{a\ e\ c\ a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{BM}=\left(\frac{a}{f}\right)\left(\frac{b_h c}{b\ b_3}\right)\left(\frac{d}{e}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{BR}=\left(\frac{b_3 f\ d}{a\ e\ c}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b}{b}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{BS}=\left(\frac{c_h b}{c\ c_3}\right)\left(\frac{a}{f}\right)\left(\frac{e}{d}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{CF} = \left(\frac{b_1 b}{a\ a_1}\right)\left(\frac{c\ e}{f\ d}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{CG} = \left(\frac{c_2 a\ c}{bf\ b_2}\right)\left(\frac{d}{e}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{DF} = \left(\frac{b_1 d\ b}{a\ c\ a_1}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{DG} = \left(\frac{a\ e}{f\ d}\right)\left(\frac{b_2 b}{c\ c_2}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{EF} = \left(\frac{b_1 f\ b}{a\ e\ a_1}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{EH} = \left(\frac{a}{f}\right)\left(\frac{b}{e}\right)\left(\frac{a_1 c}{d\ d_1}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{CM} = \left(\frac{b_h a\ c}{b\ f\ b_3}\right)\left(\frac{d}{e}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{CL} = \left(\frac{a_3 a}{b\ a_h}\right)\left(\frac{c\ e}{f\ d}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{CN} = \left(\frac{a}{b}\right)\left(\frac{c\ e\ c_3}{f\ d\ c_h}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{CR} = \left(\frac{b_h a}{b\ b_3}\right)\left(\frac{c\ e}{f\ d}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{CS} = \left(\frac{c_3 a\ c}{b\ f\ c_h}\right)\left(\frac{d}{e}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{CT} = \left(\frac{a}{b}\right)\left(\frac{d_3 f\ d}{c\ e\ d_h}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{DL} = \left(\frac{c}{f}\right)\left(\frac{a_h d\ b}{a\ c\ a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{DM} = \left(\frac{a\ e}{d\ f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h c}{b\ b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{DN} = \left(\frac{c\ b\ d}{c\ a\ c_3}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{DR}=\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{b_3 d\ b}{a\ c\ b_h}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{DS}=\left(\frac{a\ e}{f\ d}\right)\left(\frac{c_3\ c}{b\ \ c_h}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{DT}=\left(\frac{d_3 b\ d}{c\ a\ d_h}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{EL}=\left(\frac{a_h f\ b}{a\ e\ a_3}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{EM}=\left(\frac{a}{f}\right)\left(\frac{b_h e\ c}{b\ d\ b_3}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{EN}=\left(\frac{a\ e}{f\ b}\right)\left(\frac{c_h d}{c\ c_3}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{ER}=\left(\frac{b_3 f}{a}\right)\left(\frac{b_h e}{b}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)$$

$$H_{ES}=\left(\frac{a}{f}\right)\left(\frac{c_3 e\ c}{b\ d\ d_h}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{ET}=\left(\frac{a\ e}{f\ b}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_1}{a_1}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h c}{d\ d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FL}=\left(\frac{a_h b_1}{a}\right)\left(\frac{a_3 a_1}{b}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)$$

$$H_{FM}=\left(\frac{b_1 f\ d\ b_3}{a\ e\ c}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{a_1 b_h}{b}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FN}=\left(\frac{b_1 b}{a\ a_1}\right)\left(\frac{c_h d}{c\ c_3}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_2}{e_2}\right)\left(\frac{f_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{f_1}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FO}=\left(\frac{b_1 f\ d_3}{a\ e}\right)\left(\frac{a_1 c\ d_h}{b\ d}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FP}=\left(\frac{b_1 b}{a\ a_1}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e_h f}{e\ e_3}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FQ} = \left(\frac{b_1 f_3}{a}\right)\left(\frac{a_1 c\ e\ f_h}{b\ d\ f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{d_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FR} = \left(\frac{b_1 b_3}{a}\right)\left(\frac{b_h a_1}{b}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FS} = \left(\frac{b_1 f\ d\ c_h}{a\ e\ c}\right)\left(\frac{a_1 c_3}{b}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FT} = \left(\frac{b_1 b}{a\ a_1}\right)\left(\frac{d_h c}{d\ d_3}\right)\left(\frac{e}{f}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FU} = \left(\frac{b_1 f\ e_h}{a\ e}\right)\left(\frac{a_1 c\ e_3}{b\ d}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FV} = \left(\frac{b_1 b}{a\ a_1}\right)\left(\frac{c}{d}\right)\left(\frac{f_3 f}{e\ f_h}\right)\left(\frac{a_h}{a_3}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

$$H_{FX} = \left(\frac{a_h b_1}{a}\right)\left(\frac{a_1 c\ e\ a_3}{b\ d\ f}\right)\left(\frac{b_h}{b_3}\right)\left(\frac{c_2}{b_2}\right)\left(\frac{c_h}{c_3}\right)\left(\frac{d_1}{c_1}\right)\left(\frac{d_h}{d_3}\right)\left(\frac{e_2}{d_2}\right)\left(\frac{e_h}{e_3}\right)\left(\frac{f_1}{e_1}\right)\left(\frac{f_h}{f_3}\right)\left(\frac{a_2}{f_2}\right)$$

Tabla 11.

Los elementos de matriz de H para las funciones propias M y N, de acuerdo a la fórmula de Eyring, W. y K. (1.949, pag. 243) :

H_{MN} $(-1)^{\gamma}.\ 2^{x}$ $\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[\sum$ (integrales de intercambio simples entre orbitales en el mismo ciclo con spins opuestos) $-\sum$ (integrales de intercambio simples entre orbitales en el mismo ciclo con el mismo spin)$\Big] - \frac{1}{2}\sum$ (todas las integrales de intercambio simples)

donde: x es el número de ciclos y

γ es el número de intercambios entre orbitales que tienen asignado diferente spin en el diagrama en ψ_N , requeridos para hacerlo igual a ψ_M .

y con la ayuda de los correspondientes diagramas serán:

$$H_{AA} = 2^{15}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(ab) + (cd) + (ef) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{AB} = 8^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(ab) + (ad) + (af) + (cb) + (cd) + (cf) + (eb) + (ed) + (ef) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (ac) - (ae) - (ce) - (bd) - (bf) - (df)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{CC} = 2^{15}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(ab) + (cf) + (de) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2)\ (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1)\ (f_h f_3) + (a_2 f_2)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{CD} = 2^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(a\ b) + (af) + (ad) + (cb) + (cf) + (cd) + (eb) + (ef) + (ed) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1)\ (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (ac) - (ae) - (ce) - (bf) - (bd) -$$

$$\cdot (fd) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{FF} = 2^{15} \Big\{ Q + \frac{3}{2} \Big[(a\, b_1) + (b\, a_1) + (f\, e) + (d\, c) + (a_h a_3) + (b_h b_3)$$

$$(c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3)$$

$$(f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{FG} = 2^{12} \Big\{ Q + \frac{3}{2} \Big[(ab_1) + (af) + (ad) + (ab_2) + (eb_1) + (ef) + (ed) +$$

$$(eb_2) + (cb_1) + (cf) + (cd) + (cb_2) + (a_1 b) + (c_2 b)$$

$$(a_h a_3) + (b_h b_3) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2)$$

$$(e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (ae) - (ac) -$$

$$(ec) - (b_1 f) - (b_1 d) - (b_1 b_2) - (fb_2) - (fd) - (db_2)$$

$$- (a_1 c_2) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{FH} = 2^{15} \Big\{ Q + \frac{3}{2} \Big[(ab_1) + (cd_1) + (ef) + (dc_1) + (ba_1) + (a_h a_3) + (b_h b_3)$$

$$(c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_h d_3) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3)$$

$$+ (a_2 f_2) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{FI} = 2^{15} \Big\{ Q + \frac{3}{2} \Big[(ab_1) + (ba_1) + (cf) + (de_2) + (ed_2) + (a_h a_3) +$$

$$(b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_h e_3) +$$

$$(f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{LL} = 2^{15} \Big\{ Q + \frac{1}{2} \Big[(a\, a_h) + (ba_3) + (cd) + (ef) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) +$$

$$(c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) +$$

$$(f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{RR} = 2^{15} \Big\{ Q + \frac{1}{2} \Big[(ab_3) + (cd) + (ef) + (bb_h) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2)$$

$$(c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) +$$

$$(f_h f_3) + (a_2 f_2) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{LM} = 2^{12} \Big\{ Q + \frac{1}{2} \Big[(aa_h) + (af) + (ad) + (ab_3) + (ea_h) + (ef) + (ed) +$$

$$(eb_3) + (ca_h) + (cf) + (cd) + (cb_3) + (b_h b) + (a_3 b) +$$

$$(b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2)$$

$$(e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (ae) - (ac) -$$

$$-(ec) - (a_h f) - (a_h d) - (c_h b_3) - (f b_3) - (d\ b_3)\Big] -$$
$$- \tfrac{1}{2} \sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{RS} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{1}{2}\Big[(b_3 a) + (b_3 e) + (b_3 c) + (fa) + (fe) + (fc) + (da) + (de) + (dc) + (c_h a) + (c_h e) + (c_h c) + (b_h b) + (c_3 b) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_3 f) - (b_3 d) - (b_3 c_h) - (f c_h) - (fd) - (d c_h) - (ae) - (ac) - (ec)\Big] - \tfrac{1}{2} \sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{QR} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(b_3 a) + (f_3 a) + (f_h f) + (f_h d) + (f_h b) + (ef) + (ed) + (eb) + (cf) + (cd) + (cb) + (b_h f) + (b_h d) + (b_h b) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (a_2 f_2) - (b_3 f_3) - (f_h e) - (f_h c) - (f_h b_h) - (e b_h) - (ec) - (c b_h)\Big] - \tfrac{1}{2} \sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{LN} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(a_h a) + (a_h a_3) + (ba) + (ba) + (c_h c) + (c_h c_3) + (dc) + (d c_3) + (ef) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_1 d_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (a_h b) - (a a_3) - (c_h d) - (c c_3)\Big] - \tfrac{1}{2} \sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{PR} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(b_h b) + (b_h b_3) + (ab) + (a b_3) + (cd) + (e_3 f) + (e_3 e_h) + (ef) + (e e_h) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_h a) - (b b_3) - (e_3 e) - (f e_h)\Big] - \tfrac{1}{2} \sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{RT} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(b_h b) + (b_h b_3) + (ab) + (a b_3) + (d_h d) + (d_h d_3) + (cd) + (c d_3) + (ef) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_h a) - (b b_3) - (d_h c) - (d d_3)\Big] - \tfrac{1}{2} \sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{LO} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(a_h a) + (a_h e) + (fa) + (fe) + (d_3 a) + (d_3 e) + (a_3 b) + (a_3 d) + (cb) + (cd) + (d_h b) + (d_h d) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (a_h f) - (a_h d_3) - (f d_3) - (a_3 c) - (a_3 d_h) - (c\, d_h) - (ae) - (bd) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}$$

$$H_{OR} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(b_3 a) + (b_3 e) + (fa) + (fe) + (d_3 a) + (d_3 e) + (b_h b) + (b_h d) + (cb) + (cd) + (d_h b) + (d_h d) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (c_2 f_2) - (b_3 f) - (b_3 d_3) - (f d_3) - (ae) - (b_h c) (b_h d_h) - (c d_h) - (bd) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}$$

$$H_{RU} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(b_3 a) + (b_3 e) + (fa) + (fe) + (e_h a) + (e_h e) + (b_h b) + (b_h d) + (cb) + (cd) + (e_3 b) + (e_3 d) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (c_1 d_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (f_1 a_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_3 f) - (b_3 e_h) - (f e_h) - (ae) - (b_h c) (b_h e_3) - (c e_3) - (bd) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}$$

$$H_{LP} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(a_h a) + (a_h a_3) + (ba) + (ba) + (e_h e) + (e_h e_3) + (fe) + (f e_3) + (cd) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (c_1 d_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (a_h b) - (a a_3) - (e_h f) - (e e_3) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}$$

$$H_{NR} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(b_h b) + (b_h b_3) + (ab) + (a b_3) + (c_h c) + (c_h c_3) + (dc) + (d c_3) + (fe) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_1 d_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (bha) - (b\ b3) - (ohd) - (cc3) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}$$

$$H_{V} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(b_h b) + (b_h b_3) + (ab) + (a b_3) + (f_3 e) + (f_3 f_h) + (fe) + (f f_h) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (a_2 f_2) + (cd) - (b_h a) - (b b_3) - (f_3 f) - (e f_h) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}$$

$$
\begin{aligned}
H_{LQ} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (a_h a) + (f_3 a) + (f_h f) + (f_h d) + (f_h b) + (ef) + (ed) + \\
& (eb) + (cf) + (cb) + (cd) + (a_3 f) + (a_3 b) + (a_3 c) + \\
& (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + \\
& (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (a_2 f_2) - (a_h f_3) - (f_h e) - \\
& (f_h c) - (f_h a_3) - (ec) - (ea) - (ca_3) - (fd) - (fb) - \\
& (db) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{MR} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (ab_3) + (ad) + (af) + (cb_3) + (cd) + (cf) + (eb_3) + \\
& (ed) + (ef) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (bb_h) + (c_2 b_2) + \\
& (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) \\
& (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (ac) - (ae) - (ce) - (b_3 d) - (b_3 f) \\
& - (df) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{RX} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (a\ f) + (a\ d) + (a\ b) + (ef) + (ed) + (eb) + (cf) + \\
& (cd) + (cb) + (b_h f) + (b_h d) + (b_h b) + (b_3 a) + (a_h a) + \\
& (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) \\
& (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (a_3 e) - (a_3 c) - \\
& (a_3 b_1) - (eb_h) - (ec) - (cb) - (fd) - (fb) - (db) - \\
& - (b_3 a_h) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{LR} = 2^{14} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (a_h a) + (b_3 a) + (a_3 b) + (b_h b) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + \\
& (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + \\
& (f_h f_3) + (a_2 f_2) + (cd) + (ef) - (a_h b_3) - (a_3 b_h) \Big] - \\
& - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{LS} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (a_h a) + (a_h e) + (a_h c) + (fa) + (fe) + (fc) + (da) + \\
& (de) + (dc) + (c_h a) + (c_h e) + (c_h c) + (a_3 b) + (c_3 b) + \\
& (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + \\
& (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (a_h f) - (a_h d), \\
& (a_h c_h) - (fc_h) - (fd) - (dc) - (ae) - (ac) - (ec) - \\
& (a_3 c_3) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{LT} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (a_h a) + (a_h a_3) + (ba) + (ba_3) + (d_h d) + (d_h d_3) + (cd) + \\
& (cd_3) + (fe) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h e_3) +
\end{aligned}
$$

$(d_1c_1) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) +$
$- (a_hb) - (aa_3) - (d_hc) - (dd_3)\Big] - \frac{1}{2}\sum$ (todas las mn)$\Big\}$

$$H_{LU} = 2^{12}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(a_ha) + (a_he) + (fa) + (fe) + (e_ha) + (e_he) + (a_3b) + (a_3d) + (cb) + (cd) + (e_3b) + (e_3d) + (b_1a_1) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - (a_hf) - (a_he_h) - (fe_h) - (ae) - (bd) - (a_3c) - (a_3e_3) - (ce_3)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{LV} = 2^{12}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(a_ha) + (a_ha_3) + (ba) + (ba_3) + (f_3e) + (f_3f_h) + (fe) + (f\,f_h) + (b_1a_1) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (a_2f_2) + (cd) - (a_hb) - (aa_3) - (f_3f) - (ef_h)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{LX} = 2^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(aa_h) + (a_3f) + (a_3d) + (a_3b) + (ef) + (ed) + (eb) + (cf) + (cd) + (cb) + (b_1a_1) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1a_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - (a_3e) - (a_3c) - (ec) - (fd) - (fb) - (db)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{AC} = 2^{14}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(ac) + (fe) + (fc) + (de) + (dc) + (a_ha_3) + (b_1a_1) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - (fd) - (ec)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{AF} = 2^{14}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(b_1a) + (b_1a_1) + (ba) + (ba) + (cd) + (ef) + (a_ha_3) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - (b_1b) - (aa_1)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{AG} = 2^{15}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(ab) + (cd) + (ef) + (a_ha_3) + (b_1a_1) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1a_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$
\begin{aligned}
H_{BF} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (b_1a) + (b_1e) + (b_1c) + (b_1a) + (fa) + (fe) + (fc) + \\
& (fa_1) + (da) + (de) + (dc) + (da_1) + (ba) + (be) + \\
& (bc) + (ba_1) + (a_ha_3) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + \\
& (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + \\
& (a_2f_2) - (b_1f) - (b_1d) - (b_1b) - (fd) - (fb) - (db) \\
& - (ae) - (ac) - (aa_1) - (ec) - (ea_1) - (ca_1) \Big] - \tfrac{1}{2} \\
& \sum (\text{todas las } mn) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{BG} = 2^{14} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (af) + (c_2b) + (c_2b_2) + (cb) + (cb_2) + (de) + (a_ha_3) + \\
& (b_1a_1) + (b_hb_3) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + \\
& (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) + (c_2c) + (bb_2) \Big] - \\
& - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{AL} = 2^{14} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (a_ha) + (a_ha_3) + (ba) + (ba_3) + (cd) + (ef) + (b_1a_1) + \\
& (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + \\
& (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - (a_hb) - (aa_3) \Big] - \\
& - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{AM} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (b_hb) + (b_hf) + (b_hd) + (b_hb_3) + (ab) + (af) + (ad) + \\
& (ab_3) + (eb) + (ef) + (ed) + (eb_3) + (a_ha_3) + (b_1a_1) + \\
& (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + \\
& (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - (b_ha) - (b_he) - (b_hc) - \\
& (ae) - (ac) - (ec) - (bf) - (bd) - (bb) - (fd) - \\
& - (fb_3) - (db) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{AR} = 2^{14} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (b_hb) + (b_hb_3) + (ab) + (ab_3) + (cd) + (ef) + (a_ha_3) \\
& (b_1a_1) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + \\
& (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - (b_ha) - (bb_3) \Big] - \\
& - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{AS} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (c_3b) + (c_3f) + (c_3d) + (c_3c_h) + (ab) + (af) + (ad) + \\
& (ac_h) + (eb) + (ef) + (ed) + (cb) + (cf) + (cd) + \\
& (ec_h) + (cc_h) + (a_ha_3) + (b_1a_1) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + \\
& (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) +
\end{aligned}
$$

$$+(a_2f_2) - (c_3a) - (c_3e) - (c_3c) - (ae) - (ac) - (ec) -$$
$$(bf) - (bd) - (bc_h) - (fd) - (fc_h) - (dc_h)\Big] - \frac{1}{2}$$
$$\sum \text{ (todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{BL} = 2^{12}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(a_ha) + (a_he) + (a_hc) + (a_ha_3) + (fa) + (fe) + (fc) +$$
$$(fa_3) + (da) + (de) + (dc) + (da) + (ba) + (be) +$$
$$(bc) + (ba_3) + (b_1a_1) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) +$$
$$(d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) +$$
$$(a_2f_2) - (a_hf) - (a_hd) - (a_hb) - (fd) - (fb) - (db)$$
$$- (ae) - (ac) - (aa_3) - (ec) - (ea_3) - (ca_3)\Big] - \frac{1}{2}$$
$$\sum \text{ (todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{BM} = 2^{14}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(af) + (b_hb) + (b_hb_3) + (cb) + (cb_3) + (de) + (a_ha_3) +$$
$$(b_1a_1) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) +$$
$$(e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) + (b_hc) + (bb_3)\Big] -$$
$$- \frac{1}{2}\sum \text{ (todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{BR} = 2^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(b_3a) + (b_3e) + (b_3c) + (fa) + (fe) + (fc) + (da) +$$
$$(de) + (dc) + (a_ha_3) + (b_1a_1) + (bb_h) + (c_2b_2) +$$
$$(c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (e_1f_1) +$$
$$(f\ f\ ) + (a\ f\ ) - (b\ f) - (b\ d) - (fd) - (ae) - (ac)$$
$$- (ec)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{ (todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{BS} = 2^{14}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(c_hc) + (c_hc_3) + (bc) + (bc_3) + (af) + (ed) + (a_ha_3) +$$
$$(b_1a_1) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) +$$
$$(e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - (c_hb) - (cc_3)\Big] -$$
$$- \frac{1}{2}\sum \text{ (todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{CF} = 2^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(b_1a) + (b_1a_1) + (ba) + (ba_1) + (cf) + (cd) + (ef) +$$
$$(ed) + (a_ha_3) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) +$$
$$(d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2)$$
$$- (b_1b) - (aa_1)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{ (todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{CG} = 2^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(c_2b) + (c_2f) + (c_2B_2) + (ab) + (af) + (ab_2) + (cb) +$$
$$(cf) + (cb_2) + (de) + (a_ha_3) + (b_1a_1) + (b_hb_3) +$$

$$+ (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (c_2 a) - (c_2 c) - (ac) - (bf) - (bb_2) - (fb_2) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{DF} = 2^{13} \Big\{ Q + \frac{3}{2} \Big[(b_1 a) + (b_1 c) + (b_1 a) + (da) + (dc) + (da\ ) + (ba) + (bc) + (ba_1) + (ef) + (a_h a_3) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_2 e_2) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_1 d) - (b_1 b) - (ac) - (aa_1) - (ca_1) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{DG} = 2^{13} \Big\{ Q + \frac{3}{2} \Big[(af) + (ad) + (ef) + (ed) + (b_2 c) + (b_2 c_2) + (bc) + (bc_2) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) + - (ae) - (fd) - (b_2 b) - (cc_2) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{EF} = 2^{13} \Big\{ Q + \frac{3}{2} \Big[(b_1 a) + (b_1 e) + (b_1 a_1) + (fa) + (fe) + (fa_1) + (ba) + (be) + (ba_1) + (cd) + (a_h a_3) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_1 f) - (b_1 b) - (fb) - (ae) - (ea_1) \ \frac{1}{2} \Big] \ (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{EH} = 2^{14} \Big\{ Q + \frac{3}{2} \Big[(af) + (be) + (a_1 d) + (a_1 d_1) + (cd) + (cd_1) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (a_1 c) - (dd_1) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{CM} = 2^{13} \Big\{ Q + \frac{3}{2} \Big[(b_h b) + (b_h f) + (b_h b) + (ab) + (af) + (ab_3) + (cb) + (cf) + (cb_3) + (de) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_h a) - (b_h c) - (ac) - (bf) - (bb_3) - (fb_3) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}$$

$$H_{CL} = 2^{13} \Big\{ Q + \frac{3}{2} \Big[(a_3 b) + (a_3 a_h) + (ab) + (aa_h) + (cf) + (cd) + (ef) + (ed) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) + - (a_3 a) - (ba_h) - (ce) - (fd) \Big] - \frac{1}{2} \sum (\text{todas las mn})$$

$$\begin{aligned}
H_{CN} = 2^{13}\Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[&(ab) + (cf) + (cd) + (cc_h) + (ef) + (ed) + (ec_h) + \\
&(c_3f) + (c_3d) + (c_3c_h) + (a_ha_3) + (b_1a_1) + (b_hb_3) + \\
&(c_2b_2) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + \\
&(f_hf_3) + (a_2f_2) - (ce) - (cc_3) - (ec_3) - (fd) - (fc_h) \\
&- (dc_h)\Big] - \tfrac{1}{2}\sum (\text{todas las mn})\Big\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{CR} = 2^{13}\Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[&(b\ b) + (b\ b\ ) + (ab) + (ab) + (cf) + (cd) + (ef) + \\
&(ed) + (a_ha_3) + (b_1a_1) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + \\
&(d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - \\
&(b_ha) - (bb_3) - (ce) - (fd)\Big] - \tfrac{1}{2}\sum (\text{todas las mn})\Big\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{CS} = 2^{13}\Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[&(c_3b) + (c_3f) + (c_3c) + (ab) + (af) + (ac_h) + (cb) + \\
&(cf) + (cc_h) + (de) + (a_ha_3) + (b_1a_1) + (b_hb_3) + \\
&(c_2b_2) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + \\
&(f_hf_3) + (a_2f_2) - (c_3a) - (c_3c) - (ac) - (bf) - (bc_h) \\
&- (fc_h)\Big] - \tfrac{1}{2}\sum (\text{todas las mn})\Big\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{CT} = 2^{13}\Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[&(ab) + (d_3c) + (d_3e) + (d_3d_h) + (fc) + (fe) + (fd_h) + \\
&(dc) + (de) + (dd_h) + (a_ha_3) + (b_1a_1) + (b_hb_3) + \\
&(c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + \\
&(f_hf_3) + (a_2f_2) - (d_3f) - (d_3d) - (fd) - (ce) - (cd_h) \\
&- (ed_h)\Big] - \tfrac{1}{2}\sum (\text{todas las mn})\Big\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{DL} = 2^{13}\Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[&(ef) + (a_ha) + (a_hc) + (a_ha_3) + (da) + (dc) + (da_3) + \\
&(ba) + (bc) + (ba_3) + (b_1a_1) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + \\
&(c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + \\
&(f_hf_3) + (a_2f_2) - (a_hd) - (a_hb) - (db) - (ac) - (aa_3) \\
&- (ca_3)\Big] - \tfrac{1}{2}\sum (\text{todas las mn})\Big\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{DM} = 2^{13}\Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[&(ad) + (af) + (ed) + (ef) + (a_ha_3) + (b_1a_1) + (b_hb) + \\
&(b_hb_3) + (cb) + (cb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + \\
&(d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) + \\
&- (ae) - (df) - (b_hc) - (bb_3)\Big] - \tfrac{1}{2}\sum (\text{todas} \\
&\text{las mn})\Big\}
\end{aligned}$$

$$H_{DN} = 2^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(c_h c) + (c_h a) + (c_h c_3) + (bc) + (ba) + (bc) + (dc) + (da) + (dc_3) + (ef) + (a_h a_3) + (b_2 a_2) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (c_h b) - (c_h d) - (bd) - (ca) - (cc_3) - (ac_3)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{DR} = 2^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(ef) + (b_3 a) + (b_3 c) + (b_3 b_h) + (da) + (dc) + (db_h) + (ba) + (bc) + (bb_h) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_3 d) - (b_3 b) - (db) - (ac) - (ab_h) - (cb_h)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{DS} = 2^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(af) + (ad) + (ef) + (ed) + (c_3 b) + (c_3 c_h) + (cb) + (cc) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (ae) - (fd) - (c_3 c) - (bc_h)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{DT} = 2^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(d_3 c) + (d_3 a) + (d_3 d_h) + (bc) + (ba) + (bd_h) + (dc) + (da) + (dd_h) + (ef) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (d_3 b) - (d_3 d) - (bd) - (ca) - (cd_h) - (ad_h)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{EL} = 2^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(a_h a) + (a_h e) + (a_h a_3) + (fa) + (fe) + (fa_3) + (ba) + (be) + (ba_3) + (cd) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (a_h f) - (A_h b) - (fb) - (ae) - (aa_3) (ea_3)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$H_{EM} = 2^{13}\Big\{ Q + \frac{3}{2}\Big[(af) + (b_h b) + (b_h d) + (b_h b_3) + (eb) + (ed) + (eb_3) + (cb) + (cd) + (cb_3) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_h e) - (b_h c) - (ec) - (bd) - (bb_3) - (db_3)\Big] - \frac{1}{2}\sum \text{(todas las mn)}\Big\}$$

$$\begin{aligned}H_{EN} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (af) + (ab) + (ef) + (eb) + (c_h c) + (c_h c_3) + (dc) + \\ & (dc_3) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (d_1 c_1) + \\ & (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) + \\ & - (ae) - (fb) - (c_h d) - (ce_3) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}H_{ER} = 2^{14} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (b_3 a) + (fa) + (b_h b) + (eb) + (cd) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + \\ & (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + \\ & (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_3 f) - (b_h e) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum \\ & (\text{todas las } mn) \Big\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}H_{ES} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (af) + (c_3 b) + (c_3 d) + (c_3 e_h) + (eb) + (ed) + (ec_h) + \\ & (cb) + (cd) + (cc_h) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + \\ & (c_2 b_2) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + \\ & (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (c_3 e) - (c_3 c) - (ec) - (bd) - (bc_h) \\ & - (dc_h) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}H_{ET} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (af) + (ab) + (ef) + (eb) + (a_h a_3) + (b_1 a_1) + (b_h b_3) + \\ & (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d) + (d_h d_3) + (cd) + \\ & (cd_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - \\ & - (ae) - (fb) - (d_h c) - (dd_3) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}H_{FL} = 2^{14} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (a_h a) + (b_h a) + (a_3 b) + (a_3 b) + (cd) + (ef) + (b_h b_3) + \\ & (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + \\ & (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (a_h b_1) - (a_3 a_1) \Big] - \tfrac{1}{2} \\ & \sum (\text{todas las } mn) \Big\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}H_{FM} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (b_1 a) + (b_1 e) + (b_1 c) + (fa) + (fb) + (fc) + (b_3 a) + \\ & (b_3 e) + (b_3 c) + (da) + (de) + (dc) + (a_h a_3) + (a_1 b) + \\ & (b_h b) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + \\ & (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_1 f) - (b_1 d) \\ & - (b_1 b_3) - (fb_3) - (fd) - (db_3) - (a_1 b_h) - (ae) - \\ & - (ac) - (ec) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las } mn) \Big\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}H_{FN} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (b_1 a) + (b_1 a_1) + (ba) + (ba_1) + (c_h c) + (c_h c_3) + (dc) + \\ & (dc_3) + (ef) + (a_h a_3) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (d_1 c_1) +\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
& (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) \\
& - (b_1 b) - (aa_1) - (c_h d) - (cc_3) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las} \\
& \text{mn}) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{FO} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{1}{2} \Big[& (b_1 a) + (b_1 e) + (fa) + (fe) + (d_3 a) + (d_3 e) + (a_1 b) + \\
& (a_1 d) + (cb) + (cd) + (d_h b) + (d_h d) + (a_h a_3) + (b_h b_3) \\
& (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + \\
& (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_1 f) - (b_1 d_3) - (fd_3) - (ae) - \\
& (a_1 c) - (a_1 d) - (cd_h) - (bd) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las} \\
& \text{mn}) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{FP} = 2^{13} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (b_1 a) + (b_1 a_1) + (ba) + (a_1 b) + (cd) + (e_h e) + (fe) + \\
& (e_h e_3) + (fe_3) + (a_h a_3) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + \\
& (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) \\
& - (b_1 b) - (aa_1) - (e_h f) - (ee_3) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas} \\
& \text{las mn}) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{FQ} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (b_1 a) + (f_3 a) + (a_1 b) + (a_1 d) + (a_1 f) + (cb) + (cd) + \\
& (cf) + (eb) + (ed) + (ef) + (f_h b) + (f_h d) + (f_h f) + \\
& (a_h a_3) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + \\
& (e_2 d_2) + (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (a_2 f_2) - (b_1 f_3) - (a_1 c) - \\
& (a_1 e) - (a_1 f) - (cf_h) - (ce) - (ef_h) - (bd) - (bf) - \\
& (df) \Big] - \tfrac{1}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{FR} = 2^{14} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (b_1 a) + (b_3 a) + (b_h b) + (a_1 b) + (cd) + (ef) + (a_h a_3) \\
& (c_2 b_2) + (c_h c_3) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + (e_h e_3) + \\
& (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_1 b_3) - (b_h a_1) \Big] - \tfrac{1}{2} \\
& \sum (\text{todas las mn}) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{FS} = 2^{12} \Big\{ Q + \tfrac{3}{2} \Big[& (b_1 a) + (b_1 e) + (b_1 c) + (fa) + (fe) + (fc) + (da) + \\
& (de) + (dc) + (c_h a) + (c_h e) + (c_h c) + (a_1 b) + (c_3 b) + \\
& (a_h a_3) + (b_h b_3) + (c_2 b_2) + (d_1 c_1) + (d_h d_3) + (e_2 d_2) + \\
& (e_h e_3) + (f_1 e_1) + (f_h f_3) + (a_2 f_2) - (b_1 f) - (b_1 d) - \\
& (b_1 c_h) - (fd) - (fc_h) - (dc_h) - (ae) - (ac) - (ec) - \\
& (a_1 c_3) \Big] - \tfrac{3}{2} \sum (\text{todas las mn}) \Big\}
\end{aligned}
$$

$$H_{FT} = 2^{13}\Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(b_1a) + (b_1a_1) + (ba) + (ba_1) + (d_hd) + (d_hd_3) + (cd) + (cd_3) + (ef) + (a_ha_3) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - (b_1b) - (aa_1) - (d_hc) - (dd_3) \Big] - \tfrac{1}{2}\sum (\text{todas las } mn)\Big\}$$

$$H_{FU} = 2^{12}\Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(b_1a) + (b_1e) + (fa) + (fe) + (e_ha) + (e_he) + (a_1b) + (a_1d) + (cb) + (cd) + (e_3b) + (e_3d) + (a_ha_2) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - (b_1f) - (b_1e_h) - (fe_h) - (ae) - (a_1c) - (a_1e_3) - (ce_3) - (bd) \Big] - \tfrac{1}{2}\sum (\text{todas las } mn)\Big\}$$

$$H_{FV} = 2^{13}\Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(b_1a) + (b_1a_1) + (ba) + (ba_1) + (cd) + (f_3e) + (f_3f_h) + (fe) + (f_hf) + (a_ha_3) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (a_2f_2) - (b_1b) - (aa_1) - (f_3f) - (ef_h) \Big] - \tfrac{1}{2}\sum (\text{todas las } mn)\Big\}$$

$$H_{FX} = 2^{12}\Big\{ Q + \tfrac{3}{2}\Big[(a_ha) + (b_1a) + (a_1b) + (a_1d) + (a_1f) + (cb) + (cd) + (cf) + (eb) + (ed) + (ef) + (a_3b) + (a_3d) + (a_3f) + (b_hb_3) + (c_2b_2) + (c_hc_3) + (d_1c_1) + (d_hd_3) + (e_2d_2) + (e_he_3) + (f_1e_1) + (f_hf_3) + (a_2f_2) - (a_hb_1) - (a_1c) - (a_1e) - (a_1a_3) - (ce) - (ca_3) - (ea_3) - (bd) - (bf) - (df) \Big] - \tfrac{1}{2}\sum (\text{todas las } mn)\Big\}$$

mn = integrales de intercambio simples.

donde (ab) significa, como se sabe, integral de intercambio entre los orbitales a y b, y Q es un término coulómbico. Una vez escritos todos los elementos de matríz, se vé que el término "$- \frac{1}{2}\sum$ (todas las integrales de intercambio simples)" emtra en todos ellos. Podemos entonces incluirlo en la constante Q, escribiendo Q'' para el resultado.

Si nos interesan transiciones espectrales, Q'' desaparece; para el estado fundamental éste no es el caso, pero la dificultad puede ser salvada refiriendo su energía a la de la estructura de Kekulé (A, Fig.6), introduciendo así el concepto de "energía de resonancia".

Los términos S no serán detallados pués son idénticos a los coeficientes de Q".

Algunas integrales son muy pequeñas y pueden despreciarse, obteniéndose algunas simplificaciones en los elementos de matríz. Estas son:

$$\varepsilon^{*}_{\sigma h}\ ,\ \varepsilon_{\pi h}\ ,\ \varepsilon_{\sigma' h}\ ,\ \varepsilon_{\sigma h}\ ,\ \varepsilon_{hh}\ ,\ \varepsilon_{hh'}$$

(El criterio por el que no se consideran puede verse en Altmann, Proc. Roy. Soc. A, vol.210, pag.348, 1951)

De manera que finalmente tenemos: (Ver notación y Figs. 3 y 4)

$$
\begin{aligned}
H_{11} = {} & 2 \cdot 2^{15} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[3\,\varepsilon_{\pi\pi} + 6\,\varepsilon^{*}_{\sigma h} + 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} \right] \right\} + \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[6\,\varepsilon_{\pi\pi} + 6\,\varepsilon^{*}_{\sigma h} + 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} \right] \right\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{22} = {} & 3 \cdot 2^{15} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[2\,\varepsilon_{\pi\pi} + 6\,\varepsilon^{*}_{\sigma h} + 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} \right] \right\} + \\
& + 6 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[6\,\varepsilon_{\pi\pi} + 6\,\varepsilon^{*}_{\sigma h} + 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} \right] \right\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{33} = {} & 6 \cdot 2^{15} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[2\,\varepsilon_{\pi\pi} + 2\,\varepsilon_{\pi\sigma} + 6\,\varepsilon^{*}_{\sigma h} + 5\,\varepsilon_{\sigma\sigma} \right] \right\} + \\
& + 12 \cdot 2^{12} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\varepsilon_{\pi\pi} + 4\,\varepsilon_{\pi\sigma} + 6\,\varepsilon_{\sigma h} + 4\,\varepsilon_{\sigma\sigma} + 2\,\varepsilon_{\pi\sigma'} + \varepsilon^{*}_{\sigma\sigma} \right] \right\} + \\
& + 12 \cdot 2^{15} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[\varepsilon_{\pi\pi} + 4\,\varepsilon_{\pi\sigma} + 6\,\varepsilon_{\sigma' h} + 4\,\varepsilon_{\sigma\sigma} \right] \right\} \\
& + 6 \cdot 2^{15} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\varepsilon_{\pi\pi} + 6\,\varepsilon_{\sigma' h} + 4\,\varepsilon_{\sigma\sigma} \right. \right.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{44} = {} & 6 \cdot 2^{15} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[2\,\varepsilon_{\pi\pi} + \varepsilon^{*}_{\pi h} + \varepsilon_{\pi\sigma'} + 5\,\varepsilon^{*}_{\sigma' h} + 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} \right] \right\} \\
& + 6 \cdot 2^{15} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[2\,\varepsilon_{\pi\pi} + \varepsilon^{*}_{\pi h} + \varepsilon_{\pi\sigma'} + 5\,\varepsilon^{*}_{\sigma' h} + 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} \right] \right\} \\
& + 12 \cdot 2^{12} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\varepsilon_{\pi\pi} + 2\,\varepsilon^{*}_{\pi h} + 3\,\varepsilon_{\pi\sigma'} + 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} + 4\,\varepsilon^{*}_{\sigma' h} \right] \right\} \\
& + 12 \cdot 2^{12} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\varepsilon_{\pi\pi} + 2\,\varepsilon^{*}_{\pi h} + 3\,\varepsilon_{\pi\sigma'} \quad 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} \right] \right\} \\
& + 12 \cdot 2^{12} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\varepsilon_{\pi\pi} + 2\,\varepsilon^{*}_{\pi h} + 2\,\varepsilon_{\pi\sigma'} + 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} + 4\,\varepsilon^{*}_{\sigma' h} \right] \right\} \\
& + 12 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[3\,\varepsilon_{\pi\pi} + 2\,\varepsilon^{*}_{\pi h} + 2\,\varepsilon_{\pi\sigma'} + 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} + 6\,\varepsilon^{*}_{\sigma' h} \right] \right\} \\
& + 12 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[3\,\varepsilon_{\pi\pi} + 2\,\varepsilon^{*}_{\pi h} + 2\,\varepsilon_{\pi\sigma'} + 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} + 6\,\varepsilon^{*}_{\sigma' h} \right] \right\} \\
& + 12 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\varepsilon_{\pi\pi} + 2\,\varepsilon^{*}_{\pi h} + 2\,\varepsilon_{\pi\sigma'} + 6\,\varepsilon_{\sigma\sigma} + 4\,\varepsilon^{*}_{\sigma' h} \right] \right\}
\end{aligned}
$$

$$+ 12 \cdot 2^{12} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\mathcal{E}_{\pi\pi} + 2\mathcal{E}^{x}_{\pi h} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 4\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h}\right]\right\}$$

$$+ 12 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\mathcal{E}_{\pi\pi} + 2\mathcal{E}^{x}_{\pi h} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h}\right]\right\}$$

$$+ 12 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\mathcal{E}_{\pi\pi} + 2\mathcal{E}^{x}_{\pi h} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h}\right]\right\}$$

$$+ 12 \cdot 2^{14} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[2\mathcal{E}_{\pi\pi} + 2\mathcal{E}^{x}_{\pi h} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 4\mathcal{E}^{x}_{\sigma h}\right]\right\}$$

$$+ 12 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\mathcal{E}_{\pi\pi} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 5\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h}\right]\right\}$$

$$H_{12} = 6 \cdot 2^{14} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}_{\pi\sigma'} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma}\right]\right\}$$

$$H_{13} = 3 \cdot 2^{14} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma} - 2\mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma}\right]\right\}$$

$$+ 3 \cdot 2^{15} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma}\right]\right\}$$

$$+ 3 \cdot 2^{12} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[6\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma} - 2\mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'}\right]\right\}$$

$$+ 3 \cdot 2^{14} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\mathcal{E}_{\pi\sigma} + 6\mathcal{E}^{x}_{\pi' h} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma} - 2\mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma}\right]\right\}$$

$$H_{14} = 3 \cdot 2^{14} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\mathcal{E}^{x}_{\pi h} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'}\right]\right\}$$

$$+ 3 \cdot 2^{12} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[6\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'}\right]\right\}$$

$$+ 3 \cdot 2^{14} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\mathcal{E}^{x}_{\pi h} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'}\right]\right\}$$

$$+ 3 \cdot 2^{12} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[6\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'}\right]\right\}$$

$$+ 3 \cdot 2^{12} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[6\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'}\right]\right\}$$

$$+ 3 \cdot 2^{14} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} - \mathcal{E}_{\pi\sigma'}\right]\right\}$$

$$+ 3 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\mathcal{E}_{\pi\pi} + 5\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 5\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'}\right]\right\}$$

$$+ 3 \cdot 2^{14} \left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} + 6\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma'}\right]\right\}$$

$$
\begin{aligned}
H_{23} = {} & 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 2\,\mathcal{E}_{\pi\sigma} - 2\,\mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} \right] \right\} \\
& + 4 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 2\,\mathcal{E}_{\pi\sigma} - 2\,\mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 4 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 2\,\mathcal{E}_{\pi\sigma} - 2\,\mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 4 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 2\,\mathcal{E}_{\pi\sigma} - 2\,\mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} \right] \right\} \\
& + 4 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + 2\,\mathcal{E}_{\pi\sigma} - 2\,\mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{14} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[2\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} \right] \right\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{24} = {} & 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} + \mathcal{E}_{\pi\sigma} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + 2\,\mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + 2\,\mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + 2\,\mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + 2\,\mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} \\
& + 2 \cdot 2^{13} \left\{ Q'' + \tfrac{3}{2} \left[4\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{x}_{\pi h} - \mathcal{E}^{x}_{\pi\sigma} + 2\,\mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right] \right\} ;
\end{aligned}
$$

$$+\ 2\ .\ 2^{13}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 6\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} - \mathcal{E}^{*}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right]\right\}$$

$$+\ 2\ .\ 2^{13}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 6\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} - \mathcal{E}^{*}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right]\right\}$$

$$+\ 2\ .\ 2^{13}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[2\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 5\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 6\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right]\right\}$$

$$+\ 2\ .\ 2^{13}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 6\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} - \mathcal{E}^{*}_{\pi\sigma} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right]\right\}$$

$$+\ 2\ .\ 2^{13}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 6\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} - \mathcal{E}^{*}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right]\right\}$$

$$H_{34} = 6\ .\ 2^{14}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[2\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 5\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 5\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + 2\ \mathcal{E}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} - \mathcal{E}^{*}_{\sigma\sigma'} \right]\right\}$$

$$+\ 6\ .\ 2^{12}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 5\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 5\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + 2\ \mathcal{E}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} - \mathcal{E}^{*}_{\sigma\sigma'} \right]\right\}$$

$$+\ 6\ .\ 2^{13}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 6\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + 2\ \mathcal{E}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} - 3\mathcal{E}^{*}_{\pi\sigma} \right]\right\}$$

$$+\ 6\ .\ 2^{12}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 5\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 5\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + 2\ \mathcal{E}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right]\right\}$$

$$+\ 6\ .\ 2^{13}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 6\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + 2\ \mathcal{E}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} - 3\mathcal{E}^{*}_{\pi\sigma} \right]\right\}$$

$$+\ 6\ .\ 2^{12}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 5\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 5\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + \mathcal{E}_{\pi\sigma} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right]\right\}$$

$$+\ 6\ .\ 2^{14}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[2\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 5\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 5\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} - \mathcal{E}^{*}_{\sigma\sigma'} \right]\right\}$$

$$+\ 6\ .\ 2^{12}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 5\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 5\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma} + 2\ \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right.\right.$$

$$+\ 6\ .\ 2^{13}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 6\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} - 3\mathcal{E}^{*}_{\pi\sigma} \right]\right\}$$

$$+\ 6\ .\ 2^{12}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 5\mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 5\mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} \right]\right\}$$

$$+\ 2\ .\ 2^{13}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[3\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 6\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma} + \mathcal{E}_{\pi\sigma'} - 3\mathcal{E}^{*}_{\pi\sigma} \right]\right\}$$

$$+\ 2\ .\ 2^{12}\left\{ Q'' + \frac{3}{2}\left[4\ \mathcal{E}_{\pi\pi} + 5\ \mathcal{E}^{*}_{\sigma' h} + 5\ \mathcal{E}_{\sigma\sigma} + \mathcal{E}^{*}_{\pi h} + 2\mathcal{E}_{\pi\sigma} + 3\mathcal{E}_{\pi\sigma'} - \mathcal{E}^{*}_{\sigma\sigma'} \right]\right\}$$

Tomando para las integrales consideradas los valores:

$$\mathcal{E}_{\pi\pi}\ (1{,}39) = -\ 2.27\ \text{eV.}$$

$$\mathcal{E}^{x}_{\sigma'h} = -2{,}30 \text{ eV.}$$
$$\mathcal{E}^{x}_{\pi h} = 1{,}807 \text{ "}$$
$$\mathcal{E}^{x}_{s\sigma'} = 1{,}240 \text{ "}$$
$$\mathcal{E}_{\pi\sigma'} = 0{,}036 \text{ "}$$
$$\mathcal{E}^{x}_{\pi h} = 0{,}745 \text{ "}$$
$$\mathcal{E}_{\sigma\sigma} = -0{,}383 \text{ "}$$

dados por Altmann, para el etileno, (Proc.Roy. Soc. A, vol. 210, pags.340 y 348) , y para

$\mathcal{E}_{\pi c}(1{,}39) =$ 0,823 obtenido de las tablas de integrales de Kopineck (Göttingen)

(tabla 10) Pags. y

los valores numéricos de los elementos de matríz serán:

$$H_{11} - S_{11}\, E = 2 .\ 5 .\ 2^{13} (Q'' - E) - 2 .\ 2^{13} .\ 182{,}125$$
$$= 2^{15} (2{,}500\,\lambda - 91{,}062)$$
$$H_{22} - S_{22}\, E = 3 .\ 6 .\ 2^{13} (Q'' - E) - 3 .\ 2^{13} .\ 211{,}982$$
$$= 2^{15} (4{,}500\,\lambda - 159{,}736)$$
$$H_{33} - S_{33}\, E = 204 .\ 2^{12} (Q'' - E) - 2^{12} .\ 4624{,}830$$
$$= 2^{15} (25{,}500\,\lambda - 578{,}104)$$
$$H_{44} - S_{44}\, E = 324 .\ 2^{12} (Q'' - E) - 3 .\ 2^{11} .\ 6463{,}918$$
$$= 2^{15} .\ (40{,}500\,\lambda - 1211{,}985)$$
$$H_{12} - S_{12}\, E = 6 .\ 2^{14} (Q'' - E) - 9 .\ 2^{14} .\ 25{,}178$$
$$= 2^{15} (3{,}000\,\lambda - 113{,}301)$$
$$H_{13} - S_{13}\, E = 51 .\ 2^{12} (Q'' - E) - 2^{12} .\ 1853{,}631$$
$$= 2^{15} (6{,}375\,\lambda - 231{,}704)$$
$$H_{14} - S_{14}\, E = 63 .\ 2^{12} (Q'' - E) - 2^{12} .\ 2355{,}628$$
$$= 2^{15} .\ (7{,}875\,\lambda - 294{,}453)$$
$$H_{23} - S_{23}\, E = 40 .\ 2^{12} (Q'' - E) - 2^{12} .\ 1561{,}392$$
$$= 2^{15} (40{,}000\,\lambda - 195{,}174)$$
$$H_{24} - S_{24}\, E = 76 .\ 2^{12} (Q'' - E) - 2^{12} .\ 2877{,}474$$
$$= 2^{15} (9{,}500\,\lambda - 359{,}684)$$

$$H_{34} - S_{34}\ E = 132 \cdot 2^{12} (Q'' - E) - 4191{,}102$$
$$= 2^{15} (16{,}500\,\lambda - 523{,}888)$$

donde $\lambda = Q'' - E$

Nuestro problema queda entonces reducido a la solución del siguiente determinante:

$$\begin{vmatrix} -91{,}062 + 2{,}500\lambda & -113{,}301 + 3{,}000\lambda & -231{,}704 + 6{,}375 & -294{,}453+7{,}875\lambda \\ -113{,}301 + 3{,}000\lambda & -159{,}736 + 4{,}500\lambda & -195{,}174 + 5{,}000 & -359{,}684+9{,}500\lambda \\ -231{,}704 + 6{,}375\lambda & -195{,}174 + 5{,}000\lambda & -578{,}104 + 25{,}500 & -523{,}890+16{,}500\lambda \\ -294{,}453 + 7{,}875\lambda & -359{,}684 + 9{,}500\lambda & -523{,}890 + 16{,}500 & -1211{,}985+40{,}500\lambda \end{vmatrix}$$

cuyas raíces, obtenidas por el método aproximado que consiste en una combinación del de relajación y el de Raleight son:

$$\lambda_1 = 37{,}95 \text{ eV.}$$
$$\lambda_2 = 25{,}07 \text{ eV.}$$
$$\lambda_3 = 19{,}98 \text{ eV.}$$
$$\lambda_4 = -717{,}02 \text{ eV.}$$

Así que los niveles de energía resultan:

$$E_4 = Q'' + 717{,}02 \text{ eV.}$$
$$E_3 = Q'' - 19{,}98 \text{ eV.}$$
$$E_2 = Q'' - 25{,}07 \text{ eV.}$$
$$E_1 = Q'' - 37{,}95 \text{ eV.}$$

donde $E = Q'' + 37{,}95$ eV, es la energía del estado fundamental. Q'' es, como dijimos, un término coulombiano adicionado de un gran número de integrales de intercambio y su cálculo por el momento presenta dificultades insalvables. Para eludir las mismas se introduce el concepto de "resonancia". Habíamos visto que la estabilidad del benceno estaba dada por el sistema de electrones π y σ (30 en total), siendo las estructuras canónicas elegidas por considerarse de mayor peso, las indicadas en la Fig. 6. La energía de una (hipotética) estructura canónica, como A (Fig. 6) estará dada mediante la aproximación del apareamiento perfecto (Eyring, W. y K. pag. 250) por:

$$H_{AA} = 2^{15} \left\{ Q + \frac{3}{2} \left[3\,\mathcal{E}_{\pi\pi} + 6\,\mathcal{E}^{x}_{\sigma' h} + 6\,\mathcal{E}_{\sigma\sigma} \right] - \frac{1}{2} \sum \text{ (todas las mn)} \right\}$$

$$H_{AA} = 2^{15}\, Q'' + 2^{15} \cdot \frac{3}{2} \left[-3 \times 2{,}27 - 6 \times 2{,}3 - 6 \times 0{,}383 \right] \text{ eV}$$

$$= 2^{15} \left[Q'' - 34{,}21 \text{ eV} \right]$$

$$E = Q'' - 34{,}21 \text{ eV.}$$

De aquí resulta que la "energía de resonancia" del benceno referida a la estructura A es:

$$R = (37{,}95 - 34{,}21) \text{ eV} = 3{,}74 \text{ eV.}$$

e indica en cuanto la molécula de benceno es más estable que el "estado de referencia", es decir, la estructura canónica A. Este estado se define como uno formado por estructuras "normales", es decir, en las que solo existe una posibilidad de apareamiento de los electrones. Para que ésto tenga sentido es necesario que pueda fijarse la energía o calor de formación de este sistema hipotético, formado en nuestro caso (benceno) por tres dobles ligaduras normales (similares a las del etileno), tres ligaduras simples (similares a las del etano) y seis ligaduras C-H.

Hay dos métodos que permiten obtener este resultado: uno de ellos es el debido a Pauling, y el otro el de Kistiakowsky, que requiere el uso de calores de hidrogenación.

Nosotros tomaremos aquí como dato experimental de comparación el primero. Pauling usa para la determinación del calor de formación del benceno el concepto de "energía de ligadura". Ésta es una cantidad de energía que puede ser asignada a una ligadura en forma tal que, sumando los valores correspondientes a ligaduras individuales en moléculas en que no existe resonancia, se obtiene el valor apropiado del calor de formación a partir de los elementos en el estado atómico.

De acuerdo a eso se puede asignar a la energía de la estructura A (que no puede determinarse experimentalmente, puesto que es hipotética) el valor obtenido de la expresión:

$$E = 3\,E_{C=C} + 3\,E_{C-C} + 6\,E_{C-H}$$

donde los símbolos indican energías de dobles y simples ligaduras y de la ligadura carbono-hidrógeno respectivamente.

Para obtener E_{C-H} basta con tomar el calor de formación del metano y dividir por cuatro (Diferente a la"energía de disociación de la ligadura". Evans y Szwarc.)

Si deseamos obtener la energía de la doble ligadura C=C, debemos sustraer del calor de formación del etileno la energía de cuatro ligaduras C-H, Pero en el metano los orbitales del carbono son híbridos tetrahédricos mientras en el etileno son híbridos trigonales, de manera que las uniones C-H no tienen en los dos el mismo valor.

Como no se conoce la energía de la unión C-H en el etileno, usamos simplemente el valor conocido para el metano. Ya ha sido discutido por Altmann (Ciencias e Investigación, Tomo 8. No.6. Junio 52 - pag. 250-258) que esto no significa ninguna aproximación, sino que se aprovecha la naturaleza convencional de las energías de ligadura. Se desprecian efectos de "energía vibracional", "variaciones de calores específicos" y "energía de compresión".

Procediendo así Pauling ha obtenido el valor 1000 kcal./mol. para la suma de las energías de unión en el benceno. El calor de formación de la molécula gaseosa de benceno a partir de átomos separados se encuentra del calor de combustión (789,2 kcal./mol.) y los calores de formación de los productos de combustión, agua y dióxido de carbono, y tiene el valor 1039 kcal./mol.

La diferencia, 39 kcal./mol. es la energía de resonancia experimental de la molécula de benceno.

De manera que tenemos:

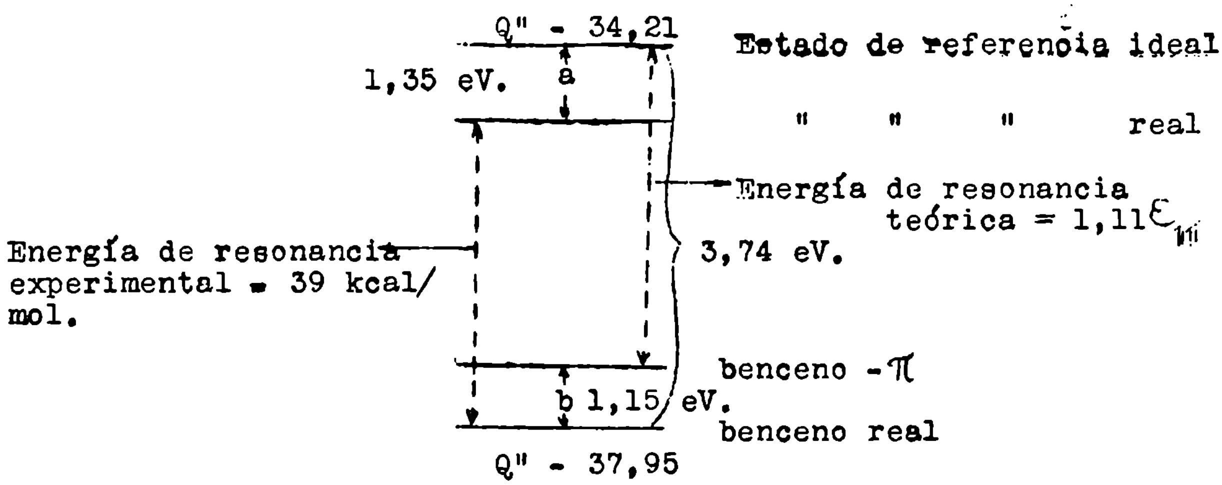


Fig. 8

Donde observamos lo siguiente:

Cuando considerando el estado fundamental del benceno en la aproximación de Hückel, tenemos en cuenta la extra-estabilidad de la molécula debida unicamente a resonancia π , estamos entonces describiendo nó el benceno real, sino un estado mas bien hipotético que llamaremos benceno-π (Fig. 8). La energía de éste se refiere a la también hipotética, estructura de Kekulé, A de la Fig. 6 (llamada estado de referencia ideal en la Fig. 8), donde ninguna resonancia, por grande que sea, es considerada (aproximación del apareamiento perfecto). El valor obtenido es la energía de resonancia "teórica" (1,11 $\mathcal{E}_{\pi\pi}$) en la aproximación usual.

La energía de resonancia experimental, como dijimos, es la obtenida por comparación de la energía de la molécula de benceno real con la de la de un estado construído con tres ligaduras dobles (etilénicas) y tres simples (como las del etano). Este estado coincidiría con el ideal si las dobles uniones etilénicas fueran una representación ajustada de una estructura perfectamente apareada.

La resonancia π - σ sin embargo, es la causa de que las uniones etilénicas se desvíen de esta condición, de manera que la energía del estado de referencia real será más baja que la del ideal por tres veces la ener gía de resonancia $\pi - \sigma$ en el etileno (0,45 eV. calculado por Altmann Proc. Roy. Soc.). Esta cantidad se indica con a en la fig. 8

$$a = 0,45 \text{ eV.} \times 3 = 1,35 \text{ eV.}$$

En la misma forma la energía del benceno real (con resonancia total o completa) debe ser más baja que la de una molécula de benceno en la cual unicamente resonancia π es considerada.

La diferencia en energía, b en la fig. 8, es la energía de resonancia $\pi - \sigma$ exclusivamente, de la molécula de benceno.

$$b = 4,74 \text{ eV.} - 2,59 \text{ eV.} = 1,15 \text{ eV.}$$

La diferencia entre a y b son muy pocas décimas de eV, como se esperaba, lo que justifica el procedimiento usual de igualar las dos energías de resonancia mostradas en la fig.8.-

BIBLIOGRAFIA

Pauling , L: The Nature of the Chemical Bond . Ithaca, Cornell University Press , 1940

Pauling , L. Wilson , E. B.,Jr.: Introduction to Quantum Mechanics. New York, McGraw-Hill, 1935

Eyring, H. , Walter, J. , Kimball, G.E.: Quantum Chemistry. New York, John Wiley, 1944

Altmann, S.L.: Proceedings of the Royal Society, A, 1951, 210, 327.

" " ": " " " " " , A, 1951, 210, 343.

Sklar, A.L.: Theory of color of the Organic Compounds, Journal of Chemical Physics, 5, 699, 1937

Altmann, S.L.: Energía de resonancia, Ciencia e Investigación - Tomo 8 . No. 6, 250, 52

Coulson, C.A.; Altmann, S.L.: Trans. of the Far. Soc. No. 352, Vol. 48, Part. 4, 52

Kopineck, H.J.: Z. Naturforsch. 5a, 420. 1950

Mulliken, R.S.: Rev. Mod. Phys. 14, 256, 1942

Coulson, C. A.: Valence. Oxford, University Press, 1952.

Mulliken, R.S.: J.Am. Chem. Soc., 1941, 63, 41.

Kopineck, H.J.: Z. Naturforsch. 5a, 420, 1950

" " "; " " 6a, 177, 1951

Rumer, G.: Nachr, Ges. Wiss. Göttingen, p.337, 1932

Maltés

Louis P. Jorge Vallejo