



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

7
2EJ

FACULTAD DE CIENCIAS

EL USO DE LA COMPUTADORA COMO UN APOYO
EN EL APRENDIZAJE DE LA FISICA Y DE LA
QUIMICA: PROPIEDADES ATOMICAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

F I S I C O

P R E S E N T A I

VIRGINIA ASTUDILLO REYES



MEXICO, D. F.

FACULTAD DE CIENCIAS
SERVICIO ESCOLAR

1995

FALLA DE ORIGEN

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

M. EN C. VIRGINIA ABRIN BATULE
Jefe de la División de Estudios Profesionales
Facultad de Ciencias
Presente

Los abajo firmantes, comunicamos a Usted, que habiendo revisado el trabajo de Tesis que realiz(ó) con 1a pasante(s) VIRGINIA ASTUDILLO REYES

con número de cuenta 6502959-4 con el Título: "El uso de la computadora como un apoyo en el aprendizaje de la Física y de la Química: Propiedades Atómicas"

Otorgamos nuestro Voto Aprobatorio y consideramos que a la brevedad deberá presentar su Examen Profesional para obtener el título de Física

| GRADO | NOMBRE(S) | APELLIDOS COMPLETOS | FIRMA |
|-------------------|-----------------------|---------------------|-------|
| M. en C. | Paúl Wayne Gómez | González | |
| Director de Tesis | | | |
| Fís. | Juan Américo González | Menéndez | |
| Dr. | Javier Miranda | Martín del Campo | |
| Dr. | Manuel Jesús Jiménez | Jiménez | |
| Suplente | | | |
| Dr. | Alipio Gustavo Calles | Martínez | |
| Suplente | | | |

Dedicatoria

Con todo mi amor
para mi adorado padre,

Pablo Humberto,

quien me enseñó a soñar
y a creer que uno
es capaz de alcanzar
lo que se propone,
y que continúa a mi lado

y

para mi adorada madre,

Conchita,

quien me ha enseñado
a enfrentar retos,
a tener la fortaleza
y la confianza en mí misma
para realizar tareas que
me parecían imposibles.

Gracias por todo el amor
que nos han dado.

A mis adorados hermanos

**Conchis,
Ruth
y
Beto**

quienes siempre me han dado su cariño, me han brindado su apoyo en todas las decisiones que he tomado y me han ayudado a hacer realidad los sueños que hemos compartido.

A mi querido tío y abuelo

Federico Reyes Montes de Oca

quien ha sido ejemplo de fortaleza, responsabilidad y superación en nuestra familia.

A mi adorado

Luis Alberto

alguien muy especial que comparte conmigo intereses y locuras, y quien se convirtió en mi apoyo y mi compañía, en los momentos más difíciles de mi vida.

A mis queridos amigos con los que he tenido la fortuna de compartir intereses y sueños.

Agradecimientos

Quiero agradecer a

mi querido profesor Raúl

el tiempo que me dedicó y la paciencia que me tuvo al dirigir este trabajo, además de reconocer que fue él quien despertó en mí la curiosidad y el interés por la Física. Realmente he sido muy afortunada en tenerlo primero como mi maestro y después como mi Director de Tesis y amigo.

Les agradezco profundamente a mis queridos amigos:

Emma Graciela Santini Ochoa

y

Javier Ramos Salamanca

el continuo y gran apoyo que me brindaron al realizar este trabajo.

De una manera muy especial quiero agradecerles a

Emilio Dorado Tovar

y

Alberto Uribe Martínez

su valiosa orientación que me permitió realizar el Programa de Cómputo para este trabajo.

A mis sinodales

Dr. Javier Miranda Martín del Campo

Fis. Juan Américo González Menéndez

Dr. Manuel Jesús Jiménez Jiménez

Dr. Alipio Gustavo Calles Martínez

les agradezco su interés, así como los comentarios y las sugerencias que hicieron a mi trabajo, los cuales me permitieron mejorarlo.

INDICE

| | |
|--|----|
| INTRODUCCION | 07 |
| I. EL USO DE LA COMPUTADORA COMO UN APOYO EN EL APRENDIZAJE | |
| Diferentes usos de la computadora en el ámbito educativo | 09 |
| Programas de Computación Educativos | 10 |
| Clasificación de los Programas de Computación Educativos (PCE) | 11 |
| Antecedentes de la enseñanza asistida por computadora | 13 |
| Primeros usos de la computadora en la enseñanza | 13 |
| Experiencias sobre el uso de la computadora como un apoyo didáctico | 14 |
| Algunos ejemplos sobre el uso de la computadora en la enseñanza de la Física y de la Química | 15 |
| Bibliografía | 23 |
| II. EL PROGRAMA DE COMPUTO | |
| Acceso al programa | 27 |
| Descripción del programa | 28 |
| Diagrama de flujo | 29 |
| 1. Modelo de R. Gómez para calcular energías atómicas | 34 |
| 2. Determinación de energías por nivel y total | 34 |
| 3. Gráfica de energías | 36 |
| 4. Gráfica de radios | 36 |
| 5. Gráfica de potenciales de ionización | 37 |
| 6. Comparación de propiedades atómicas entre elementos | 37 |
| 7. Características de los elementos | 38 |
| 8. Salir | 38 |
| Bibliografía y Notas | 39 |
| III. MODELOS PARA CALCULAR ENERGIAS ATOMICAS | |
| Antecedentes | 40 |
| Método de Thomas-Fermi | 43 |
| Método de Hartree-Fock | 46 |
| Método de Sucher | 50 |
| Método de Weisskopf | 56 |
| Método de Raúl W. Gómez González | 62 |
| IV. CONCLUSIONES | 79 |
| BIBLIOGRAFIA | 83 |
| ANEXOS | 85 |

Introducción

Desarrollé este trabajo en torno a dos aspectos que, desde mi particular punto de vista, son fundamentales: uno, abordar un problema interesante dentro del campo de la Física que permitiera ampliar mi formación en esta disciplina y otro, que la resolución de este problema aportara elementos que pudiera recuperar para ser aplicados dentro de la actividad profesional que desarrollo en el campo de la enseñanza de la Física y de la Química.

El problema que se abordó fue sobre diferentes modelos físicos que permiten determinar propiedades atómicas de los elementos para contrastar los resultados obtenidos con ellos y con valores experimentales, y conocer tanto las ventajas como las limitaciones en su aplicación.

Encontré cuál es la dificultad que involucra la resolución de este problema en cada método propuesto, cuáles son las herramientas matemáticas que se requieren en cada caso, si hay o no necesidad de apoyos adicionales como la computadora, cuáles son las limitaciones de las diferentes propuestas al predecir las propiedades y, al contrastar los resultados, si alguna de ellas reportaba ventajas significativas en su uso, en particular, en lo que se refiere a su aplicación dentro de cursos de Física y Química.

La falta de preparación suficiente tanto de los estudiantes al ingresar a nuestras escuelas como del profesor que no siempre cuenta con una formación didáctica, la insuficiencia de recursos materiales y la ausencia de materiales de apoyo adecuados a las necesidades particulares del nivel educativo, plan de estudios y programas de las asignaturas son algunas de las causas que han provocado los problemas que todos conocemos en la enseñanza y el aprendizaje de las Ciencias.

Los altos índices de reprobación que presentan las asignaturas asociadas con disciplinas científicas como la Física, la Matemática o la Química son un indicador que hace evidente esta problemática, donde resalta lo poco atractivas que ellas resultan para la mayoría de los alumnos de Enseñanza Media Básica y Superior, situación que se ve reflejada en el bajísimo ingreso a carreras dentro del campo científico e incluso el tecnológico. Por ello considero muy importante explorar nuevas alternativas que favorezcan el buen desarrollo del trabajo de profesores y alumnos.

Este trabajo está estructurado en cuatro capítulos:

- En el primer capítulo, **EL USO DE LA COMPUTADORA COMO UN APOYO EN EL APRENDIZAJE**, incluyo algunos de los diferentes usos que se han dado a la computadora en el ámbito educativo, que

son los Programas de Cómputo Educativos y su clasificación, cuáles son los antecedentes de la enseñanza asistida por computadora así como los primeros usos de los PCE, qué experiencia se tiene sobre el uso de la computadora como un apoyo didáctico y algunos ejemplos de su aplicación en la enseñanza y aprendizaje de la Física y la Química. En este capítulo incluyo un listado de las referencias bibliográficas consultadas.

- En el segundo capítulo, EL PROGRAMA DE COMPUTO, presento la descripción del Programa de Cómputo Educativo (PCE) desarrollado en BASIC y que elaboré sobre Propiedades Atómicas de los 109 elementos. En esta parte de mi trabajo incluyo el diagrama de flujo del PCE con la intención de presentar una visión global de lo que es posible hacer al utilizarlo como un material de apoyo. Describo en qué consiste cada una de las 8 alternativas que presento en el Contenido del Programa de Cómputo, así como la bibliografía que consulté para desarrollarlo. En la parte final del Trabajo de Tesis aparece en un anexo especial el listado documentado del programa de cómputo que elaboré.

- En el tercer capítulo, MODELOS PARA DETERMINAR ENERGÍAS ATÓMICAS, incluyo algunos antecedentes al uso de métodos específicos para la determinación de la energía total en el estado base de los diferentes elementos como una de sus propiedades atómicas, así como los métodos propuestos por Thomas y Fermi, Hartree y Fock, Sucher, Weisskopf y Gómez. En cada uno de los métodos propuestos menciono cuáles son las consideraciones que fundamentan su desarrollo, algunas de sus limitaciones y ventajas. Además incluyo las gráficas que relacionan a las energías totales de los elementos con su número atómico para cada uno de los métodos planteados y comparo los resultados de manera global en una sola gráfica. Comparo gráficamente los valores experimentales que se encuentran reportados con los resultados obtenidos con los métodos de Hartree y Fock, Sucher, Weisskopf y Gómez. La sencillez y alta confiabilidad de los valores calculados para las energías por nivel y total de cada uno de los 109 elementos por el método propuesto por R. W. Gómez fueron los motivos que me llevaron a decidir el seleccionar su método para utilizarlo como modelo en la determinación de energías por nivel y totales dentro del programa de cómputo que desarrollé sobre Propiedades Atómicas.

- Finalmente, presento un capítulo con las CONCLUSIONES tanto en lo referente al problema sobre la determinación de propiedades atómicas de los elementos, en particular para encontrar las energías por nivel y totales de los elementos en su estado base, y en relación con el uso de la computadora como un apoyo didáctico para mejorar el aprendizaje.

I. El uso de la computadora como un apoyo en el aprendizaje

Independientemente del nivel educativo en el que se trabaje, de la disciplina que se estudie o de la dificultad que para los alumnos pueda representar su aprendizaje, es deseable que el profesor cuente con materiales didácticos que le permitan desarrollar mejor su trabajo como orientador y motivador en el proceso de aprendizaje y que garanticen el éxito, tanto en su tarea como educador, como en el desempeño de sus alumnos. Uno de los recursos didácticos que ha sido poco explorado y menos aplicado en nuestro país es la computadora.

Es poca la gente que en México se ha preocupado por desarrollar investigación educativa sobre el uso de la computadora como un apoyo didáctico, quienes lo han aplicado dentro de los cursos y, un número todavía más reducido, aquéllos que se han preocupado por diseñar, desarrollar, aplicar y evaluar programas computacionales que permitan resolver algunos de los problemas que se presentan en las aulas o en los laboratorios de sus escuelas.

Junto con la falta de información sobre esta opción, existen otros factores que juegan un papel importante en la escasa aplicación de este recurso: uno, las permanentes limitaciones presupuestales en las escuelas, principalmente en instituciones públicas que la consideran como una alternativa fuera de nuestro alcance y otro, el pensarlo como un sustituto del profesor.

La computadora es sólo una de muchas alternativas que pueden favorecer el buen desarrollo del trabajo de profesores y alumnos y, a juzgar por los altos índices de reprobación que presentan las asignaturas asociadas con disciplinas científicas como la Física o la Química, considero que esta propuesta, relativamente nueva para nosotros, puede ser una buena opción que puede ayudar en la solución de algunos problemas de aprendizaje.

En este capítulo presento algunos de sus posibles usos dentro del ámbito educativo, experiencias que se han tenido dentro de este campo en México y en otros países, que son los llamados programas de computación educativos (PCE) y los diferentes tipos en que pueden ser clasificados.

Diferentes usos de la computadora en el ámbito educativo

La gran capacidad para almacenar información y la posibilidad de tener fácilmente acceso a ella, así como su rápido procesamiento, son algunas de las ventajas que tenemos con la computadora. Su uso en el campo educativo proporciona una amplia gama de

posibilidades: la utilización de procesadores de texto, hojas de cálculo, bases de datos, programas de computación educativos, el diseño de programas de cómputo que permitan la resolución de problemas específicos y el uso del multimedia.

La selección de alguna o algunas de estas alternativas estará en función del objetivo de aprendizaje que se tenga como meta. Por ejemplo: en la realización de investigaciones experimentales puede ser un buen apoyo el uso del LOTUS que, como una hoja de cálculo, permite realizar el registro de los valores numéricos correspondientes a las magnitudes que se han determinado, el cálculo de otras, la construcción de gráficas y su análisis en la búsqueda de relaciones existentes entre ellas. Es importante que el estudiante conozca cómo puede tener acceso a catálogos y la forma en que puede utilizarlos en la búsqueda de información. Otra opción es el uso de Programas de Computación Educativos (PCE), como los llamados de "evaluación", donde la computadora presenta preguntas, acepta respuestas, califica y reporta resultados.

Programas de Computación Educativos

Se ha diseñado y desarrollado software específico cuya función primordial es el actuar como un apoyo didáctico en la enseñanza y el aprendizaje. Este tipo de programas es lo que conocemos como Programas de Computación Educativos (PCE).

El Software Educativo desarrollado ha atendido diferentes niveles educativos y con diferentes modelos de programa, dentro de una multitud de áreas del conocimiento como las siguientes:

- * en la enseñanza sobre estudios sociales (1),
- * en la enseñanza de las Matemáticas (2, 3),
- * en la formación de profesores (4, 5),
- * en la enseñanza sobre la redacción de textos, el aprendizaje de la ortografía, la comprensión de lectura y el aprendizaje de una lengua extranjera (6, 7,8),
- * en la enseñanza sobre el uso de catálogos para la búsqueda de información (9, 10),
- * en la enseñanza de la educación ambiental (11)
- * en aprendizaje de la computación (12, 13),
- * en la enseñanza dentro de diferentes áreas de las Ciencias de la Salud (Medicina y Enfermería) para el diagnóstico y selección de tratamiento indicando las dosis de los medicamentos (14, 15, 16)
- * en la enseñanza en el área de la agricultura (17, 18)

- * en la enseñanza a niños con problemas de aprendizaje (19, 20),
- * en la enseñanza sobre el diseño industrial (21),
- * en el desarrollo de sistemas de evaluación formativa (22, 23),
- * para la enseñanza en diferentes ramas de la Ingeniería (24, 25),
- * en la enseñanza en el área de la Biblioteconomía (26)
- * y, por supuesto, para la enseñanza y el aprendizaje de la Ciencia, en particular de la Física y de la Química (de la referencia 30 a la 40).

Clasificación de los Programas de Cómputo Educativos (PCE)

La clasificación de programas de computación educativos, como toda clasificación, es arbitraria, y varía con el autor consultado (27). Sin embargo, presento una propuesta de clasificación en diferentes tipos de modelos que fundamento de acuerdo a las características que identifican a los programas:

CONSULTA: El estudiante hace consulta de datos almacenados en la computadora, bajo la forma de textos, gráficos, etc. (consulta directa) o de menús y listados (consulta indirecta).

AUTOR: El sistema opera sobre un conjunto de archivos o banco de datos a los que se puede acceder a través de un algoritmo. Su carácter semidinámico está dado por la posibilidad del alumno de solicitar una combinación especial de temas y la computadora selecciona textos referentes a esta combinación.

SOLUCION DE PROBLEMAS: El apoyo prestado por la computadora a la enseñanza está relacionado a su capacidad de procesamiento. El estudiante usa la computadora para solucionar un problema, siendo necesario para eso que conozca un lenguaje que le permita introducir a la computadora los datos y los pasos a ser seguidos para encontrar la solución.

EJERCICIO Y PRACTICA: Este tipo de utilización es a través de la presentación de ejercicios, con el reforzamiento de respuestas correctas y la "retroalimentación".

Las respuestas pueden ser de opción múltiple, tocando al alumno optar por un ítem o recibir la "retroalimentación" relativa a la opción; a estos programas de EJERCICIO Y PRACTICA se les llama de elección múltiple explícita.

Cuando se posibilita al alumno a escribir su respuesta a estos programas de EJERCICIO Y PRACTICA se les llama de elección múltiple implícita. Es necesario que el programa prevea todas las posibles respuestas, ya que solo para las respuestas previstas es posible la "retroalimentación".

CUESTIONAMIENTO: En este caso el alumno tendrá que explicar un fenómeno, usando la computadora como fuente de respuestas para sus preguntas.

Como en el caso anterior, existen dos posibilidades:

a) Aquellos programas que tienen que preveer todas las preguntas a ser hechas por los alumnos, ya que la máquina solo procesa las informaciones contenidas en el banco de datos cuando la pregunta hecha está prevista en el programa, llamados de CUESTIONAMIENTO con solo respuestas previstas y

b) En los que se da la posibilidad de la computadora para suministrar respuestas plausibles, cuando la información solicitada no consta en el banco de datos llamados de CUESTIONAMIENTO con solo respuestas no previstas. La computadora tendrá que responder con los datos que posea a través de discriminación.

TUTORIAL: La computadora es la responsable de la instrucción. Almacena no solo los contenidos, sino también la lógica instruccional.

Se presentan dos posibilidades:

a) una que presupone la división del tema en partes o el establecimiento de una secuencia instruccional que utiliza la técnica de instrucción programada lineal. A este tipo de programa se le llama TUTORIAL no inteligente y

b) Otra que presupone la división del tema en partes o el establecimiento de una secuencia instruccional pero que se basa en un sistema de instrucción programada ramificada, que presupone opciones instruccionales de acuerdo con el desempeño del alumno. Este desempeño está explicitado en términos de respuestas emitidas, siendo necesaria por tanto la previsión del mayor número posible de respuestas. Cuanto mayor sea la previsión más "inteligente" será el programa tutorial. Este tipo de programa se llama TUTORIAL inteligente.

SIMULACION: La computadora presenta al alumno el modelo de una situación real o hipotética.

Existen dos alternativas:

a) Cuando el modelo está fijo, siendo permitido al alumno entrar con un pequeño número de variables que describen el comportamiento del modelo; al programa se le llama de **SIMULACION** estática, y

b) cuando se le permite interferir al estudiante en el modelo de la situación, incluyendo o retirando variables, actuando en la estructura de la simulación; al programa se le llama de **SIMULACION** dinámica.

MODELIZACION: La modelización es lo contrario a la simulación. Aquí la computadora muestra algunos hechos representativos de un fenómeno dado, y se solicita un programa (construir un modelo) de este fenómeno. Al final el estudiante debe comparar sus resultados con los del profesor.

ACTIVIDADES CREADORAS: En este tipo el alumno organiza secuencias que posibilitan crear o elaborar nuevos materiales. La computadora opera reorganizando los elementos de esa secuencia. Es usada en actividades de composición de música, reorganización de palabras de un texto, etc.

Antecedentes de la Enseñanza asistida por computadora

Sidney Pressey es reconocido generalmente como el pionero de las máquinas de enseñanza (28). En la década de los 20's diseñó varias máquinas con el propósito inicial de examinar a sus alumnos; éstas presentaban una serie de preguntas de elección múltiple y se seleccionaba la respuesta presionando un botón. Si la respuesta era correcta se pasaba a la siguiente pregunta, si no, se registraba el error y se repetía el intento hasta encontrar la respuesta correcta. Pressey encontró que la máquina enseñaba, aunque no contaba con el respaldo de una Teoría de Aprendizaje.

Primeros usos de la computadora en la Enseñanza

Teniendo como antecedente la máquina de enseñanza, los primeros usos de la computadora en el campo educativo incluyen la creación de la máquina denominada SAKI, controlada por computadora, cuyo objetivo era enseñar el manejo de un tablero de 10 teclas. Sin embargo este uso aislado de la computadora es muy elemental y no corresponde aún a lo que se conocerá después como Enseñanza Auxiliada por Computadora (EAC).

El primer programa de enseñanza auxiliada por computadora se desarrolló en el Centro de Investigación de la IBM al final de los años 50's, como parte de un proyecto de investigación sobre memoria y aprendizaje, con el objeto de simular una máquina de enseñanza en una computadora.

Experiencias sobre el uso de la computadora como un Apoyo Didáctico

En esta parte del capítulo presento el resultado de una investigación, fundamentalmente bibliográfica, sobre trabajos que han sido publicados en relación al uso de la computadora. De toda esta información (de un total de 166 referencias, seleccioné como de interés general a 138), que en su mayoría fue obtenida a partir de la consulta a los Bancos de Información Computarizada Latinoamericano e Internacional del Centro de Investigación Científica y Humanística (CICH) de la UNAM, seleccioné aquella que consideré de interés para este trabajo de tesis por tratarse de su aplicación en la enseñanza y aprendizaje de la Física y la Química en diferentes niveles educativos.

En la revisión de la primera selección de estas 138 fuentes de información, encontré referencias concernientes a trabajos realizados en 14 países, de ellas 48 referencias correspondían al campo del enseñanza de la Física o la Química en 8 países [E.E.U.U., Inglaterra, México, Brasil, Chile, Nigeria, Italia y Cuba], y el resto de las referencias plantean el uso de la computadora en otros campos [Canadá, Turquía, Holanda, Bulgaria, Costa Rica y República Dominicana].

Es claro que no todo lo que se hace en el ámbito de la utilización o producción de materiales computacionales dirigidos a la enseñanza llevan consigo la realización de artículos de divulgación que presenten lo desarrollado por ellos. Se sabe de otros países, como España y Francia, que producen este tipo de materiales pero, o no existe interés en dar a conocer sus experiencias o solo existe el interés comercial por producir y ampliar el número de compradores del producto que elaboran, como puede verse en anuncios que aparecen en las revistas comerciales sobre software y hardware.

De la investigación que realicé sobre las experiencias que se tienen en el uso de la computadora como un apoyo en el aprendizaje de la FÍSICA y la QUÍMICA puedo afirmar lo siguiente:

* En la mayoría de los casos la evaluación de los resultados sobre el diseño y aplicación del software educativo NO se lleva a cabo.

* Parece que uno de los países más interesado en el uso de la computadora como un apoyo cotidiano a los alumnos y profesores en los cursos, así como en la difusión de sus propuestas y experiencias es E.E.U.U., ya que de las 48 referencias mencionadas 25 son de este país (52%) y son los primeros que iniciaron este trabajo (1970) contando con una experiencia de más de 24 años.

* Los tipos de programas de computación educativos que predominan son de ejercicio-práctica y de simulación; también aparecen, aunque con menor frecuencia, el uso de hojas de cálculo que incluyen la graficación.

- * Contrastando la información para la enseñanza en los dos campos señalados, encontré que predomina el diseño de software educativo para Física sobre el de Química.
- * En la mayoría de los casos se desarrollan los programas sobre temas que tradicionalmente se abordan en cursos de Mecánica y de Electricidad, que incluyen simulaciones de experiencias en el laboratorio.
- * Predomina el diseño y utilización de PCE para los niveles Medio Básico y Medio Superior sobre los niveles Técnicos o de Educación Superior.
- * En la mayor parte de los casos estos programas se diseñan y desarrollan primero, y después se busca cómo insertarlos en los cursos de Física o de Química.
- * En pocos casos, como sí está ocurriendo actualmente en México y ocurrió en Brasil, el uso de la computadora y la planeación, diseño, elaboración y aplicación del software educativo respondió a las necesidades específicas de la institución educativa (nivel, programas de las asignaturas, temas, tipo de programas computacionales,...) dentro de un Programa Institucional Educativo aplicado a nivel nacional.

Algunos ejemplos sobre el uso de la computadora en la Enseñanza y el aprendizaje de la Física y de la Química en México y en otros países

A continuación mencionaré algunos ejemplos que considero interesantes y que pueden ayudar a formar una idea más clara sobre las experiencias concretas que se tienen en el uso de la computadora como un recurso que permite mejorar el aprendizaje. En el análisis de esta información me pareció importante resaltar las características que permiten, además de conocer en lo general el contenido de cada uno de los trabajos, el contrastar de manera más objetiva y amplia cada una de estas referencias. Estas características son:

EVALUACION DE RESULTADOS: indico si hubo o no una evaluación concreta de los resultados obtenidos del proyecto, los mecanismos o instrumentos para realizar este proceso y los resultados obtenidos.

TIPO DE MODELO: especifico los tipos de modelos de PEC que fueron utilizados o propuestos por los autores.

AREA: especifico el área de conocimiento donde fueron desarrollados y/o aplicados

OBSERVACIONES: menciono algunos aspectos que consideré relevantes en los trabajos consultados.

Ejemplos

En Inglaterra (29):

| EVALUACION RESULTADOS | TIPO DE MODELO | AREA | OBSERVACIONES |
|------------------------------|-----------------------|---------------------------------|--|
| no hay | simulación | Enseñanza de Física Estadística | simulaciones en la enseñanza de la Física Estadística en el nivel A del Nuffield sobre difusión, equilibrio, movimiento molecular a través de una membrana, movimiento cuántico en la vecindad entre átomos, desintegración-decaimiento nucleares, y vida media. |

En Brasil (30):

| EVALUACION RESULTADOS | TIPO DE MODELO | AREA | OBSERVACIONES |
|--|-----------------------|---|--|
| reporta el diseño e instrumentación de programas de simulación | simulación | diseño de programas de simulación de laboratorio en Biología y Física | el alumno hace pruebas experimentales donde recolecta información, la analiza e interpreta como sustituto de trabajo experimental en el área de Ecología (POLUT) y de Electricidad (LEY DE OHM). |

En E.E.U.U. (31):

| EVALUACION RESULTADOS | TIPO DE MODELO | AREA | OBSERVACIONES |
|---|---|--|---|
| <p>presenta resultados del Proyecto COEXIST para investigar sobre formas de uso de la computadora en la enseñanza de Física y Matemáticas</p> | <p>diseño de programas para graficar, encontrar soluciones y modelos a ecuaciones</p> | <p>enseñanza de Física y Matemáticas</p> | <p>Diseñaron en el laboratorio programas en 5 áreas de trabajo (con construcción y despliegue de gráficas hechas por computadora): propagación de ondas en un medio dispersor, rayos catódicos, diseño de programa para calcular un gran número de patrones e interferencia y difracción, se dan métodos generales para encontrar patrones de mapeo en un campo para una distribución en un sector respecto a carga y corriente, y soluciones para ecuaciones simples de Schrödinger.</p> |

En Brasil (32):

| EVALUACION RESULTADOS | TIPO DE MODELO | AREA | OBSERVACIONES |
|--|-----------------------|---|--|
| reporta el diseño e instrumentación de programas de simulación | simulación | diseño de programas de simulación de laboratorio en Biología y Física | el alumno hace pruebas experimentales donde recolecta información, la analiza e interpreta como sustituto de trabajo experimental en el área de Ecología (POLUT) y de Electricidad (LEY DE OHM). |

En México (33):

| EVALUACION RESULTADOS | TIPO DE MODELO | AREA | OBSERVACIONES |
|---|----------------------------|--|--|
| en 1986 se contaba con 20 centros y se instalaron 600 computadoras en 40 escuelas para 13000 alumnos en 1986-8. Desarrollaron 30 programas y se adecuaron 50. Hay programas de formación para maestros. | simulación, bases de datos | enseñanza de matemáticas programación ciencias naturales, lenguaje, computación, Matemáticas, Química, Física, Biología y Ciencias Sociales para Nivel Medio Básico y Superior | la Fundación A. Rosenblueth estableció el Proyecto Galileo, Educación para el Siglo XXI, con una concepción pedagógica piagetiana y en el aprendizaje por la experimentación. Plantea establecer una red de 60 centros de servicio para 1800 niños con 200 instructores y especialistas, y la elaboración de software educativo. |

En Chile (34):

| EVALUACION RESULTADOS | TIPO DE MODELO | AREA | OBSERVACIONES |
|---|------------------------------|--|--|
| presenta resultados de la aplicación de un banco de items | banco de información (items) | enseñanza de la Matemática, Español, Ciencias Naturales y Sociales | banco de ITEMS como un sistema de evaluación (prueba objetiva de alternativa de opción múltiple) con objetivos específicos, efectividad y permanencia. |

En E.E.U.U. (35):

| EVALUACION RESULTADOS | TIPO DE MODELO | AREA | OBSERVACIONES |
|---|-----------------------|--|---|
| se presenta la evaluación a 119 estudiantes que utilizaron la computadora | simulación | aprendizaje de estudiantes de 4º y 5º grados en Ciencia Física | el propósito de este estudio fue examinar los efectos de la instrucción animada y niveles de práctica sobre la aplicación del aprendizaje en una lección instructiva (CBI) basada en la computadora con 119 estudiantes de 4º y 5º grado participaron en una lección introductoria de las leyes de movimiento de Newton. Se trabajaron tres niveles de elaboración visual (gráficas estáticas, gráficas animadas, no-gráficas). |

En México (36 y 37):

| EVALUACION RESULTADOS | TIPO DE MODELO | AREA | OBSERVACIONES |
|---|---------------------------------------|--|---|
| se aplicó el uso de la computadora en grupos de 1ª Inscripción y del Programa de Apoyo a las Materias Difíciles PAMAD de Física I, II y III y en Química I en los Ciclos Escolares 91-92, 92-93 y 93-94 | hoja de cálculo (LOTUS) y graficación | enseñanza de la Física y de la Química en el Nivel Medio Superior (Plantel Oriente del CCH de la UNAM) | se presentó un Plan de Trabajo en el Plantel Oriente del CCH por 8 profesores del Area de Ciencias Experimentales para instalar computadoras en los laboratorios de Física y Química para utilizarlas como un apoyo en el registro y análisis de información de investigaciones, fundamentalmente experimentales diseñadas por los alumnos. |

En México (38,39,40):

| EVALUACION RESULTADOS | TIPO DE MODELO | AREA | OBSERVACIONES |
|--|----------------|---|---|
| <p>existe control permanente sobre la coherencia entre los programas de las asignaturas y los PCE elaborados; existe retroalimentación con las experiencias de los profesores en sus cursos, y un continuo programa de formación de los docentes</p> | <p>todos</p> | <p>enseñanza en los diferentes niveles en el Sistema Educativo Nacional, en particular sobre la Física y la Química</p> | <p>en la enseñanza en los Niveles Elemental, Medio Básico y Superior en las Areas de Ciencias Naturales y Sociales, Matemáticas y Español con el Programa COEEBA de la SEP y el Instituto Latinoamericano de la Comunicación Educativa (ILCE). se han elaborado 4 PCE para Nivel Preescolar, para Primaria 221 y 749 para Secundaria, se capacito a 141429 profesores y se cuenta con Centros de Computación y Servicios Educativos en todas las entidades federativas de nuestro país con 26494 equipos.</p> |

En Cuba (41):

| EVALUACION RESULTADOS | TIPO DE MODELO | AREA | OBSERVACIONES |
|---|---|--|--|
| <p>el uso de paquetería en la docencia superior de Física ha permitido el perfeccionamiento de versiones nuevas</p> | <p>simulación, tabulación y gráficas hasta en 3 dimensiones</p> | <p>enseñanza de la Física en el Nivel Superior</p> | <p>presentan 6 paquetes de programas (oscilaciones y ondas, óptica, difracción de rayos X, física cuántica, atómica y nuclear) y su metodología de empleo en el Proyecto Physics de los centros de Educación Superior de Cuba en el que los alumnos descubren regularidades y leyes, desarrollan habilidades de cálculos, interpretación, análisis, síntesis y generalización.</p> |

BIBLIOGRAFIA

- 1 Ehman, Lee H. et al. "Using Computer Databases in Student Problem Solving: A Study of Eight Social Studies Teacher's Classrooms" en Theory and Research in Social Education, vol. 20, No. 2, pp. 179-206, 1992
- 2 Harrison, Nancy y Van Devender, Evelyn M. "Effects of Drill-and-Practice Computer Instruction on Learning Basis Mathematics Facts" en Journal of Computing in Childhood Education, vol. 3, No. 3-4, p349-56, 1992
- 3 Brown, David y Schneider, Shanon. "Young Learners' Reactions to Problem Solving Contrasted by Distinctly Divergent Computer Interfaces" en Journal of Computing in Childhood Education, vol. 3, Nos. 3 y 4, pp. 335-47, 1992
- 4 Coleman, Mark. "Developing Computer Techniques and Tools for Writing Teachers" en Journal of Computing in Higher Education, vol. 4, No. 1, pp. 38-49, 1992.
- 5 Keirns, Johanna. "Does Computer Coursework Transfer into Teaching Practice? A Follow-up Study of Teachers in a Computer Course" en Journal of Computing in Teacher Education, vol. 8, No. 4, pp. 29-31, 1992.
- 6 Wise, Barbara W.. "Whole words and Decoding for Short-Term Learning: Comparasions on "talking-Computer" System" en Journal of Experimental Child Psychology, vol. 54, NO. 2, pp. 147-67, 1992.
- 7 Balester, Valerie et al. "Scharing Authority: Collaborative Teaching in a Computer-Based Writing Course" en Computers and Composition, vol. 9, No. 3, pp. 25-40, 1992.
- 8 Schrier, Leslie L y Fast, Michael G.. "Foreing Language in the Elementary Schools and Computer-Assisted Language Learning" en Hispania, vol. 75, No. 5, pp. 1304-12, 1992.
- 9 Bellman, Beryl L.. "Computer Communications and Learning" en New Directions for teaching and learning (Teaching in the Information Age: The role of Educational Technology); No. 51, pp. 55-63, 1992.

-
- 13 Buchanan, Nancy L. et al. "The Effectiveness of a Projected Computerized Presentation in Teaching Online Library Catalog Searching" en College and Research Libraries, vol. 53, No. 4, pp. 307-18, 1992.
 - 11 Ramondetta, June. "Using Computers. Learning from Lunchroom Trash" en Learning, vol. 20, No. 8, pp. 59, Apr-May 1992.
 - 12 Shibli, Abdullah. "Increasing Learning with Writing in Quantitative and Computer Courses" en College Teaching, vol. 40, No. 4, pp. 123-27, 1992.
 - 13 McWeeney, Mark G.. "Computer-Assisted Instruction to Teach DOS Commands: A Pilot Study" en Research Strategies, vol. 10, No. 1, pp. 17-23, 1992.
 - 14 Lyon, Harold C. et al. "PlanAlyzer, an Interactive Computer-Assited Program to teach Clinical Problem-Solving in Diagnosing Anemia y Coronary Artery Disease" en Academic Medicine, vol. 67, No. 12, pp. 8-21, 1992.
 - 15 Billings, Diane M. y Cobb, Karen L.. "Effects of Learning Style Preferences, Attitude and GPA on Learner Achievement Using Computer Assisted Interactive Videodisc Instruction" en Journal of Computr- Based Instruction, vol. 19, No. 1, pp. 12-16, 1992.
 - 16 Anderson, G. D.. "Aprendizaje de las Ciencias de la Salud" en Docencia, p36-49, 1975.
 - 17 Iddings, R. Keith y Apps, Jerold W.. "Learning Preferences and Farm Computer Use. Implications for extension Programming" en Journal of Extension, vol. 30, pp. 16-17, 1992.
 - 18 Birkenholz, Robert et al. "Computers in Teaching: A Decade of Experience" en Agricultural Education Magazine, vol. 64, No. 8, pp. 4-17, 1992.
 - 19 Okolo, Cynthia M.. "The effects of Computer-Based Attribution Retraining on the Attributions, Persistence, and Mathematics Computation of Students with Learning Disabilities" en Journal of Learning Disabilities, vol. 25, No. 5, pp. 327-34, 1992.
 - 20 Van Daal, Victor H.y Van der Leij, Aryan. "Computer-Based Reading and Spelling Practice for Children with Learning Disabilities" en Journal of Learning Disabilities, vol. 25, No. 3, pp. 186-95, 1992.

-
- 21 Nikov, Alexander S. y Georgiev, Georgi G.. "Computer Based Learning and Training in Colour Harmony" en Interactive Learning International, vol. 8, No. 1, pp. 75-78, 1992.
 - 22 Costi Santarosa, L.. "Efectos interactivos de la evaluación por la computadora como la ansiedad y la actitud sobre el aprendizaje de los alumnos" en Tecnología Educativa, p23-24, 1981.
 - 23 Costi Santarosa, L.. "Actitud de los alumnos con referencia a la utilización de la computadora en el proceso enseñanza-aprendizaje" en Tecnología Educativa, pp. 18-21, 1982.
 - 24 Schumann, Heinz. "Didactic Aspects of Geometry Learning in Secondary Educational Using the Computer as an Interactive Tool" en Journal of Computers in Mathematics and Science Teaching, vol. 11, No. 2, p217-42, 1992.
 - 25 Fernández de los Reyes, Armando, Díaz Pontones, Vicente y Corrales Barrios, Luis. "El uso de las computadoras en especialidades de Ingeniería" en Revista Cubana de Educación Superior, vol.21, pp. 6-20, Cuba.
 - 26 Robredo, J., Antúnez, W. y Bastos Vidal, F.. "Nuevas Técnicas de instrucción programada con ayuda de computadora" en Scola de Biblioteconomia de UFMG de Belo Horizonte, v13, N2, pp.33-34, 1984.
 - 27 Engel Aduan Wanda. "O computador na Educação: Herói ou bandido?" en Tecnología Educativa, vol.12, No. 52. pp.47-52, 1983.
 - 28 Méndez Martínez, Jorge. "Usos de la computadora en la educación superior" en Perfiles Educativos, pp. 23-36, 1979.
 - 29 Bligh, P. H.. "The Use of Computers in Teaching Statistical Physics al Nuffield A Level" en Physics Education, vol. 9, No. 6, pp. 403-409, 1974.
 - 30 Romiszowski Alexander, J. "Simulación: el uso de la computadora como laboratorio" en Tecnología Educativa, vol. 13, No. 58, pp. 57-65, 1984.
 - 31 Merrill, John R.. "Use of computer in Introductory Physics Teaching" en Computers in Human Behavior, vol. 4, pp. 37-52, 1988.
 - 32 Romiszowski Alexander, J. "Simulación: el uso de la computadora como laboratorio" en Tecnología Educativa, vol. 13, No. 58, pp. 57-65, 1984.
 - 33 Calderón Alzati Enrique y Deffis Ramos, Gustavo. "Proyecto Galileo, educación para el silo XXI" en Comunidad Informática, vol. 10, No. 31, pp. 9-17, 1987.

-
- 34 Zavalza, Javier y Cantallope, Jaime. "El computador como apoyo en la evaluación" en Revista de Educación, No. 136, pp. 32-35, 1985.
 - 35 Rieber, Lloyd P. "The effects of computer Animated Lesson Presentations and Cognitive Practice Activites on Young Children's Learning in Physical Science" en Proceedings of Selected Research Papers presented at the Annual Meeting of the Association for Educational Communications and Technology, pp. 17, 1989.
 - 36 Astudillo Reyes Virginia et al. Proyecto sobre la Aplicación "La Computación y la Física" presentado a la Dirección del Plantel Oriente del Colegio de Ciencias y Humanidades. México, UNAM, 25 de agosto de 1992.
 - 37 Astudillo Reyes, Virginia. Informe de Actividades Académicas realizadas del 1° de octubre de 1992 al 30 de septiembre de 1993 que contiene el apartado correspondiente a la aplicación del Proyecto "La Computación y la Física" que fue presentado a la Dirección de la Unidad Académica del Ciclo de Bachillerato del Colegio de Ciencias y Humanidades, México, UNAM, 13 de octubre de 1993.
 - 38 Martínez Mercado, Cristina. "Informe sobre la Planeación, Diseño, Aplicación y Resultados del Proyecto COEEBA en México" en el Informe Anual del ILCE, México, ILCE, 1994.
 - 39 Programa de Computación Electrónica en la Educación Básica de la Secretaría de Educación Pública. "Informática para la Educación. Presentación" en Programa de Computación Electrónica en la Educación Básica de la Secretaría de Educación Pública (COEEBA-SEP). Informe Anual de 1993. México, ILCE, 1993.
 - 40 Programa de Computación Electrónica en la Educación Básica de la Secretaría de Educación Pública. "Reseña de COEEBA" en Programa de Computación Electrónica en la Educación Básica de la Secretaría de Educación Pública (COEEBA-SEP). Informe Anual de 1993. México, ILCE, 1993.
 - 41 Fonseca Duarte, Alejandro. "Los paquetes de programas: ondas, óptica, rayos X, fotones, átomos y núcleos, y sus aplicaciones en la enseñanza asistida por computadora (EAC)" en Revista Mexicana de Física, vol. 39, No. 3, Cuba-México, 1993.

II. EL PROGRAMA DE COMPUTO

Al programa le llamé "PROPIEDADES ATOMICAS" y está contenido en el archivo PROPSATM.BAS. El propósito principal del programa computacional que he desarrollado es el cálculo de las **energías por nivel y total** para cada uno de los 109 elementos utilizando el modelo geométrico propuesto por el M. en C. Raúl W. Gómez González. El listado del programa puede encontrarse en el Anexo A del presente trabajo.

El programa es capaz de construir las gráficas que relacionan los radios, las energías totales y los primeros potenciales de ionización de los elementos con sus correspondientes números atómicos, tanto para la totalidad de elementos como para algún conjunto de ellos determinado por un intervalo de números atómicos seleccionado libremente por el usuario.

A través de su utilización es posible realizar la comparación de propiedades atómicas (radio, primer potencial de ionización y afinidad electrónica) entre 4 elementos elegidos de acuerdo al interés particular del usuario que hace esta consulta, donde se le muestran las dimensiones relativas de los elementos a través de figuras, así como un despliegue del número atómico y del nombre de los que ha elegido.

Adicionalmente a esta información, es posible tener acceso a la consulta de información particular sobre cada elemento dado su número atómico; de esta manera, al seleccionar el valor de Z deseado, se presenta el nombre y símbolo del elemento, así como la configuración electrónica de su estado base, el término espectral que le corresponde de acuerdo a su estado fundamental, la energía total, el primer potencial de ionización, el radio y la afinidad electrónica.

De manera paralela, diseñé el programa para que pueda ser utilizado como un apoyo en el aprendizaje de algunas propiedades atómicas de los elementos en cursos de Física y Química, se trata de un Programa de Cómputo Educativo (PCE).

El lenguaje de programación en que desarrollé este trabajo es el BASIC (Beginner's All-Purpose Symbolic Instruction Code), que tiene la particularidad de ser un lenguaje conversacional, que en la mayoría de las computadoras se encuentra disponible como intérprete y permite la rápida realización de cálculos a partir de la consulta de valores almacenados en él.

Acceso al Programa

1º Si la computadora tiene tarjeta graficadora VGA no será necesario instalar el SIMCGA.COM para poder correr sin dificultad alguna este programa. De otra manera, será necesario instalar primero el

SIMCGA.COM para que el programa pueda ejecutarse sin que aparezca problema alguno en la graficación o en el despliegue de las figuras.

2° Instalar el BASICA.EXE o acceder a este paquete en caso de que ya exista en el disco duro de la computadora.

3° Teclar "Load" o presionar <F3>, seguido de la palabra **PROPSATM**, que es el nombre del programa, y presionar <ENTER>. En pantalla aparecerá **OK** para indicarnos que el programa ha sido cargado.

4° Teclar "Run" o presionar <F2> y después <ENTER>; de esta manera haremos correr el programa, que nos indicará por sí mismo qué es lo que habremos de hacer.

5° En caso de que se quiera suspender o terminar la sesión de trabajo, es suficiente con regresar a la pantalla de **CONTENIDO** y elegir la opción 7, o teclar simultáneamente:

<SHIFT>+<CONTROL>+<ENTER> .

Descripción del Programa

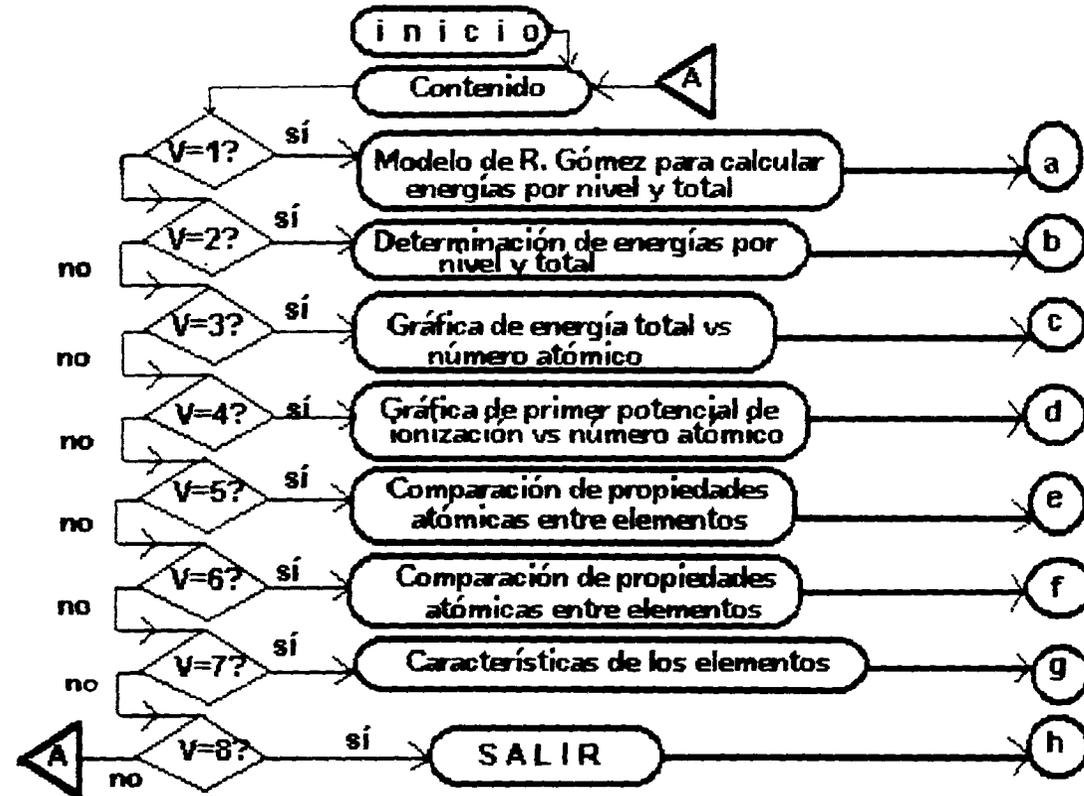
En este apartado describo de manera clara y concreta en qué consiste este programa; la explicación viene acompañada de un diagrama de flujo en que desarrollo las 8 opciones que se tienen como alternativas.

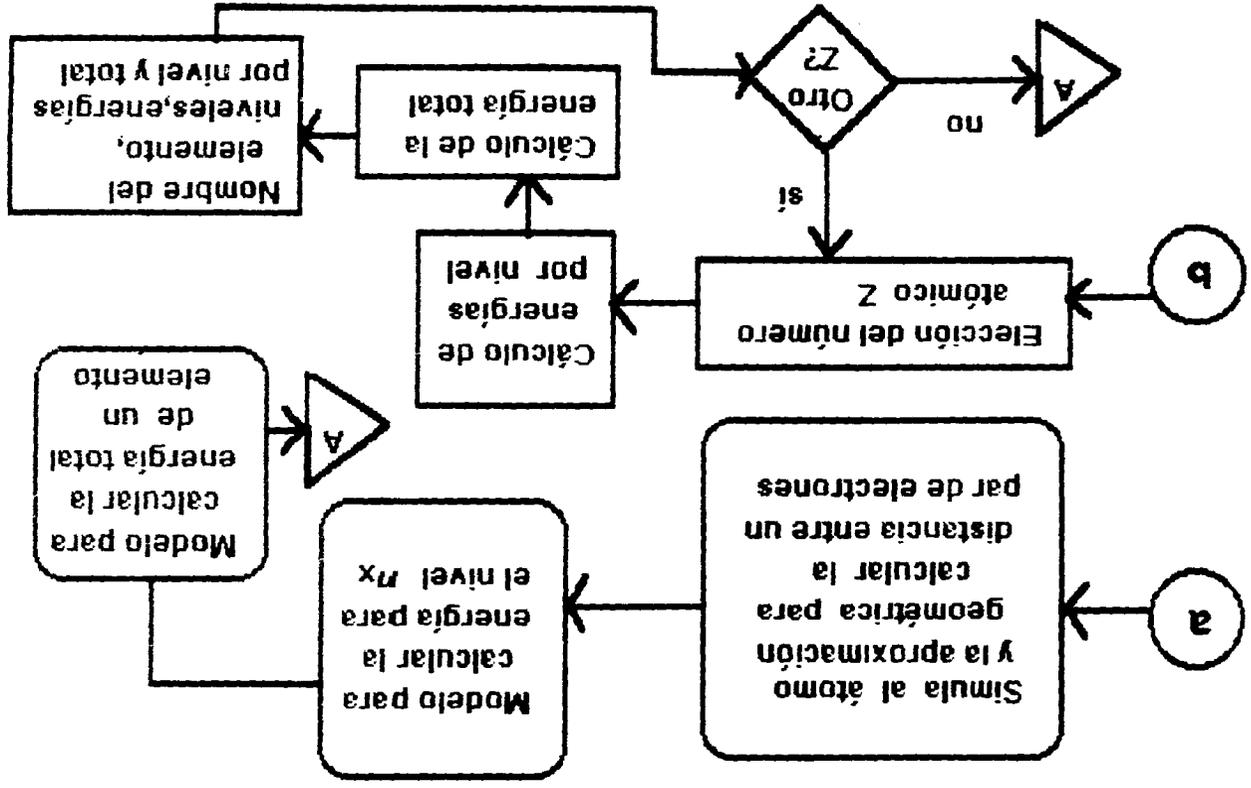
Después de la presentación del programa (líneas 5-230) aparece la pantalla del **CONTENIDO** (líneas de la 240 a 270) para que el usuario seleccione una de ocho opciones:

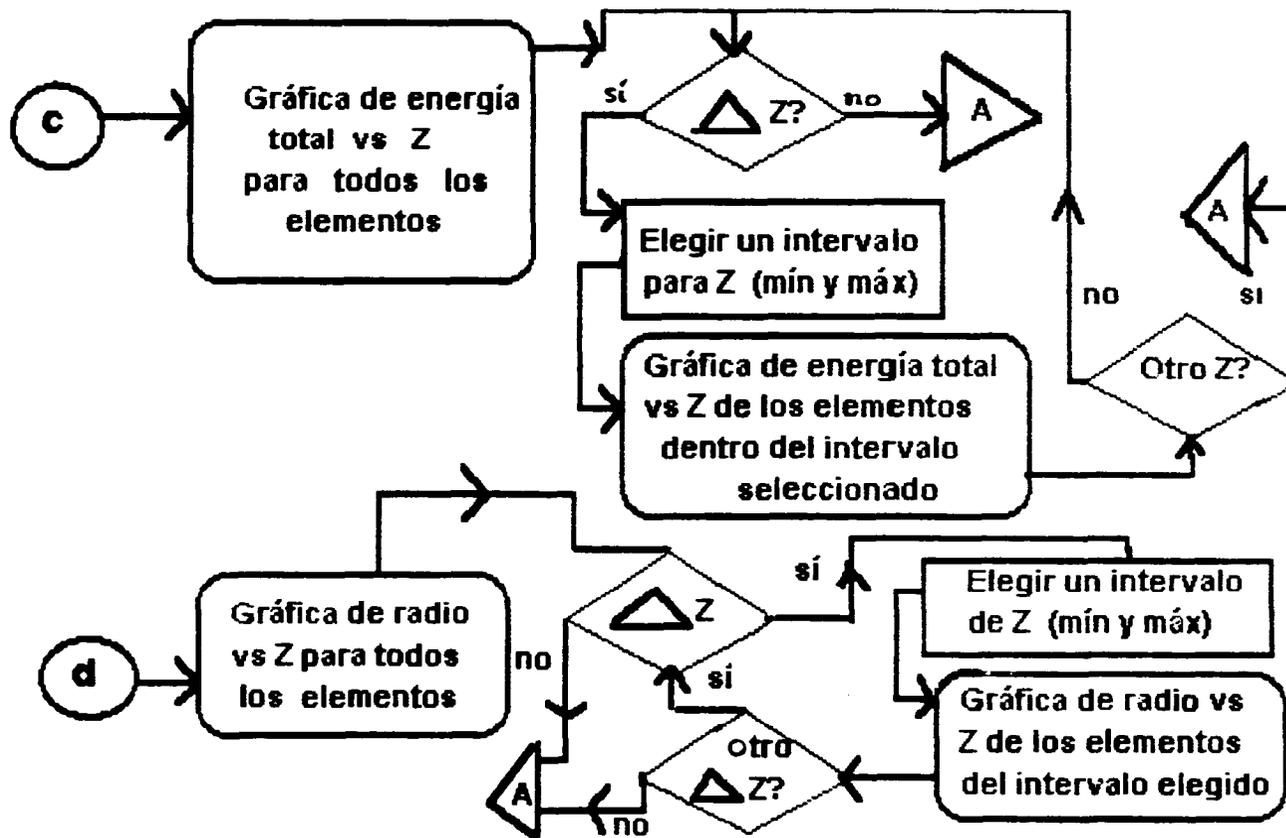
1. Modelo de R. Gómez para calcular energías atómicas:
2. Determinación de Energías por nivel y total
3. Gráfica de Energías Totales
4. Gráfica de Radios Atómico
5. Gráfica de Primer Potencial de Ionización
6. Comparación de propiedades atómicas entre elementos
7. Características de los elementos
8. Salir

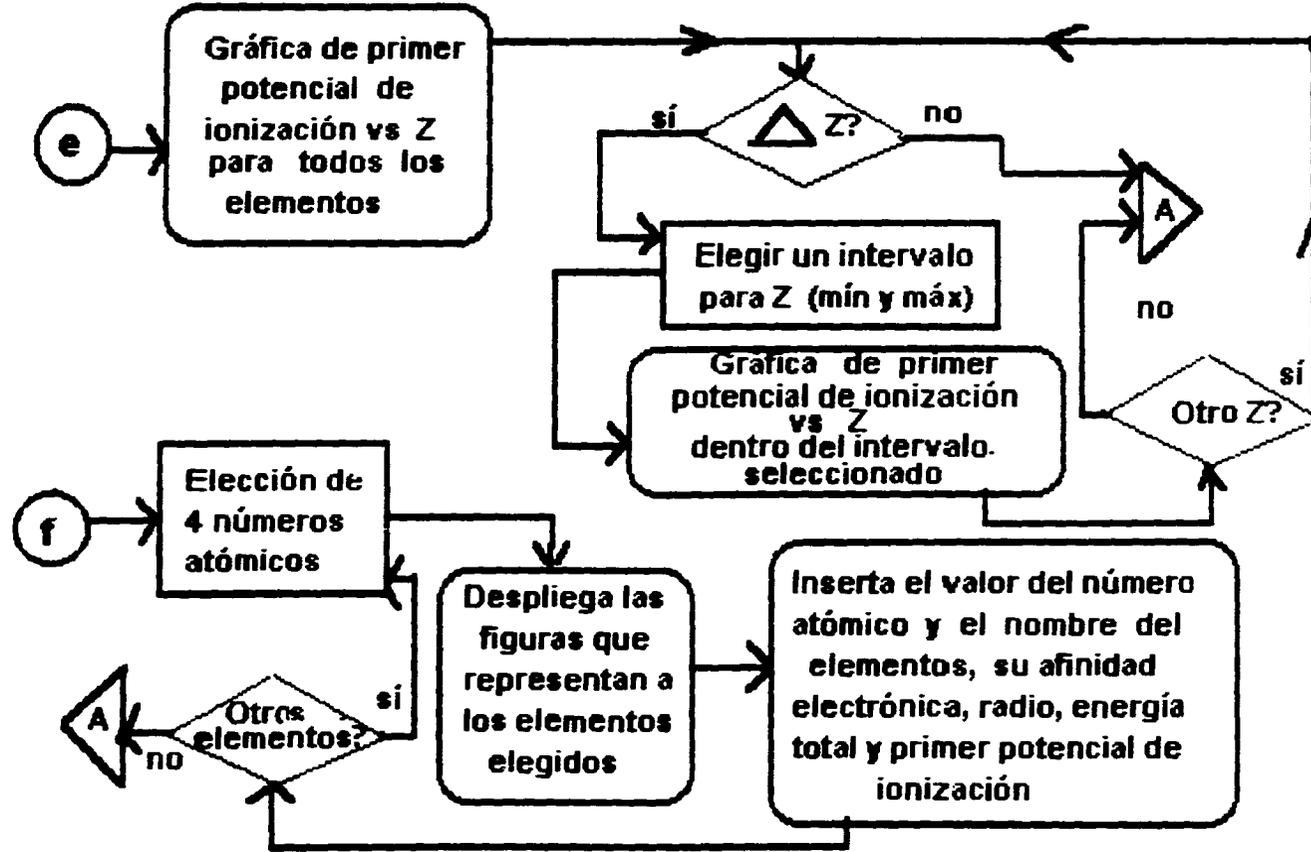
En caso de que el usuario decida escribir cualquier número diferente a las alternativas presentadas, aparece en pantalla un mensaje de error (líneas 310 a 320) donde se aclara que ha cometido una equivocación al seleccionar la opción y le regresa a la pantalla del **CONTENIDO**.

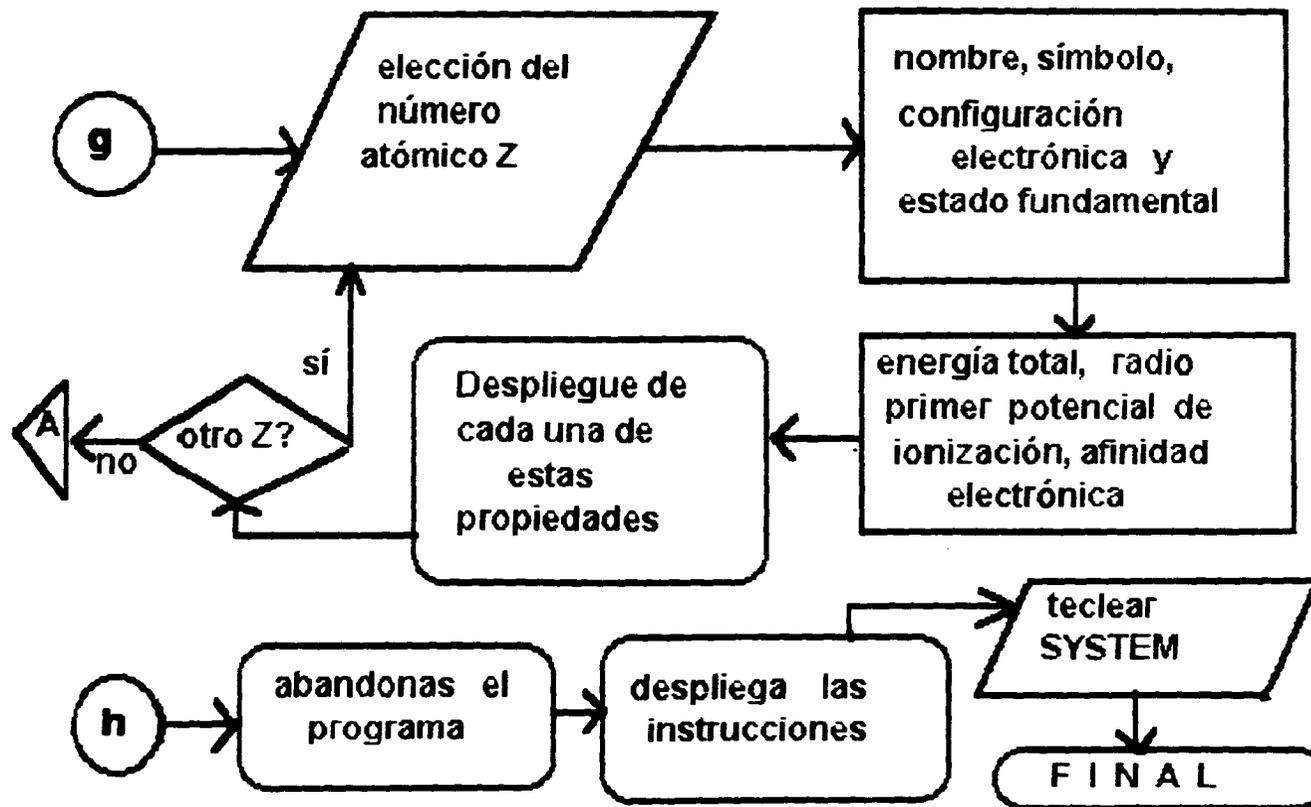
Diagrama de flujo de PROPSATM.BAS











Para el desarrollo de las tres primeras alternativas de este Programa que involucran el cálculo de energías atómicas de los elementos como una de las propiedades atómicas que los caracteriza, se consideró el modelo semiclásico propuesto por Raúl W. Gómez el cual se encuentra desarrollado en detalle en el tercer capítulo de este trabajo, "Modelos para determinar energías atómicas".

1. Modelo de R. Gómez para calcular energías atómicas

Cuando elige la primera opción (líneas 55000 a 57800) se presenta inicialmente una serie de representaciones gráficas para mostrar cuál es la consideración geométrica que permite hacer una aproximación a la distancia entre dos electrones que se encuentran en la misma órbita:

$$|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$$

considerándola igual al promedio entre la distancia más próxima entre electrones, r , y la distancia más lejana, $2r$.

Se despliegan en pantalla la expresión para calcular la energía por nivel:

$$E_x = \frac{[2 \cdot Z_x \cdot N_x - (N_x - 1) \cdot N_x \cdot \beta]^2}{8 \cdot N_x \cdot (n_x)^2}$$

donde $\beta = 2/(\sqrt{2} + 2) = 0.585786$, que puede ser aplicada para cada uno de los 109 elementos.

Se precisa cuáles son las magnitudes que aparecen en las expresiones y que habrán de determinarse a partir de la configuración electrónica de los elementos.

2. Determinación de energías por nivel y total

Al seleccionar la segunda opción (líneas 650-2435) aparece en pantalla una pregunta sobre el número atómico del elemento que se quiere consultar. Si se tecléa un número que no sea un entero dentro del intervalo [1,109], de nuevo aparecerá en pantalla un mensaje de error donde se aclara que es incorrecto el valor dado a Z y se regresa al usuario a la pregunta inicial (línea 660).

Cuando se elige un valor de Z correcto, el programa lee los valores que le corresponden de n_x , N_x y Z_x de para cada nivel, así como el valor β , y ser sustituidos en la expresión para calcular la energía que le corresponde a éste:

$$E_x = \frac{[2 \cdot Z_x \cdot N_x - (N_x - 1) \cdot N_x \cdot \beta]^2}{8 \cdot N_x \cdot (n_x)^2}$$

continúa la ejecución del programa y se determina la energía total del elemento y aparece en pantalla la siguiente información organizada en columnas: el nombre, el nivel, la energía para cada nivel y su energía total del elemento que se ha seleccionado.

En la parte final de la pantalla se pregunta al usuario si desea consultar otro elemento. En caso afirmativo, regresa a la misma secuencia. Si responde negativamente, entonces se dirige a la pantalla del CONTENIDO.

Para que se pueda calcular por nivel cada una de las energías se requiere que, dado Z , se tenga acceso a los valores de las siguientes magnitudes que aparecen en las expresiones anteriores:

n_x representa el nivel u órbita en el que se encuentra el electrón

N_x es el número de electrones en la órbita n_x

Z_x representa el número de electrones externos

β representa la constante correspondiente a la aproximación geométrica ($\beta = 0.585786$)

Estos valores los determiné de acuerdo a la configuración electrónica de cada uno de los elementos (1), y los agrupé en **intervalos de Z** que tenían en común las expresiones para n_x , N_x y Z_x . De esta manera reduje el número de opciones original de 109 a **27 alternativas** (líneas 750 a 1200) lo que representa una reducción del 75%, aproximadamente. Para cada terna de variables n_x , N_x y Z_x , que son acompañadas de un RETURN, se envió a calcular e imprimir en pantalla los valores correspondientes a E_x para cada nivel (líneas 2260 a 2290), mediante un GOSUB, excepto para el último valor de N_x ; en este caso se trata del nivel más externo, en donde se da la instrucción GOTO 2340 del último cálculo de E_x y la determinación de T que corresponde a la **energía total E** del átomo (líneas 2380 a 2410).

De la línea 1210 a la 2254 capturé información correspondiente a los números atómicos, los nombres de cada uno de los elementos, su configuración electrónica y el término de su estado fundamental; en esta parte de la ejecución del programa solamente se utilizan las dos primeros datos. Con el acceso a esta información es posible imprimir en pantalla los resultados de las energías por

nivel, así como el valor de la energía total, el número atómico y el nombre del elemento.

Una vez que se ha terminado este proceso, nuevamente se le pregunta al usuario si desea hacer otro cálculo (líneas 2425 a 2435), de manera que se le permite repetir la secuencia o regresar a la pantalla del CONTENIDO.

3. Gráfica de energías

Al seleccionar la tercera opción (líneas 9000 a 10362) primero se presenta en pantalla una gráfica que relaciona el Número Atómico de todos los elementos con la energía total de cada uno de ellos (líneas 9000 a 9360).

Después aparece en pantalla la alternativa de elegir un intervalo de números atómicos (líneas 9361 a 9370). Si el usuario responde negativamente, entonces se regresa a la pantalla de CONTENIDO; si responde afirmativamente, entonces aparecen en pantalla dos preguntas que permiten establecer los valores mínimo y máximo de los números atómicos deseados (líneas 9550 a 9560) y, una vez que éstos se han registrado, despliega en pantalla la sección de la gráfica que relaciona el número atómico con la energía total, dentro del intervalo definido para Z, ajustando los valores numéricos que aparecen en la escala del eje de las energías.

Cuando se ha terminado la construcción de la gráfica se plantea la opción de consultar otro intervalo o salir de esta secuencia (líneas 9365 a 9377).

4. Gráfica de radios

Al elegir la cuarta opción (líneas 7000 a 8470) se presenta en pantalla una gráfica que relaciona el Número Atómico de todos los elementos con sus radios (líneas 7000 a 7360), después aparece en pantalla la alternativa de elegir un intervalo de números atómicos (líneas 7362 a 7377). Si se responde negativamente, como en la alternativa anterior, se regresa a la pantalla de CONTENIDO; si se responde afirmativamente, entonces aparecen en pantalla dos preguntas que permiten establecer los valores mínimo y máximo de los números atómicos deseados (líneas 7362 a 8062) y, una vez que éstos se han registrado, se despliega en pantalla la sección de la gráfica que relaciona el número atómico con el radio, dentro del intervalo definido para Z.

Los valores de los radios por nivel para cada uno de los elementos fueron consultados del Atomic Data 3, 1-131 de 1971 (2) y aparecen registrados en el Anexo B.

Al igual que en la opción anterior, cuando se ha terminado la construcción de la gráfica se plantea la opción de consultar otro intervalo o salir de esta secuencia (líneas 7362 a 7377).

5. Gráfica de potenciales de ionización

Al seleccionar la quinta opción (líneas 12000 a 15220) primero se presenta en pantalla una gráfica que relaciona el número atómico de todos los elementos con el primer potencial de ionización de cada uno de ellos (líneas 12000 a 12360).

Después aparece en pantalla la alternativa de elegir un intervalo de números atómicos (líneas 12362 a 12377). Si el usuario responde negativamente, entonces se regresa a la pantalla de CONTENIDO; si responde afirmativamente, entonces aparecen en pantalla dos preguntas que permiten establecer los valores mínimo y máximo de los números atómicos deseados (líneas 12550 a 12560) y, una vez que éstos se han registrado, se despliega en pantalla la sección de la gráfica que relaciona el número atómico con el primer potencial de ionización, dentro del intervalo definido para Z.

Los valores de los primeros potenciales de ionización para cada uno de los elementos fueron consultados de la 72^{na} Edition del "Handbook of Chemistry and Physics" (3) y aparecen registrados en el Anexo B.

Cuando se ha terminado la construcción de la gráfica se plantea la opción de consultar otro intervalo o salir de esta secuencia (líneas 15200 a 15220).

6. Comparación de propiedades atómicas entre elementos

Al elegir la sexta alternativa (líneas 3000 a 5550) se pueden seleccionar elementos para contrastar algunas de sus propiedades atómicas (radio, afinidad electrónica y potencial de ionización) a partir de sus números atómicos.

Se despliega una pantalla que señala las unidades utilizadas para las afinidades electrónicas, los potenciales de ionización y los radios (líneas 3000 a 3009).

Aparece en pantalla una serie de 4 preguntas (líneas 3010 a 3100) para que se seleccionen los primeros elementos que se desean comparar de acuerdo a tres propiedades (radio, afinidad electrónica y potencial de ionización) a partir de sus números atómicos. Si se tecléa un número que no sea un entero dentro del intervalo [1,109], de nuevo aparecerá en pantalla un mensaje de error donde se aclara que es incorrecto el valor dado a Z y se regresa al usuario a la pregunta inicial.

Una vez que se han seleccionado los cuatro números atómicos, aparece la pantalla dividida en cuatro cuadrantes que contienen una figura que simula una esfera con el radio correspondiente al valor del número atómico elegido: esta esfera representa el átomo

del elemento seleccionado y se despliega junto con el valor de Z y el nombre del elemento. Después aparecen las afinidades electrónicas, los radios y los potenciales de ionización (líneas 3119 a 3960).

Los valores de las configuraciones electrónicas, de los radios por nivel y de los primeros potenciales de ionización para cada uno de los elementos aparecen registrados en los Anexos indicados en las secciones anteriores. Las afinidades electrónicas fueron consultadas de la 72nd Edition del "Handbook of Chemistry and Physics" (4) y aparecen en el Anexo B.

Como en las alternativas anteriores, se plantea la opción de consultar otro conjunto de elementos o salir de esta secuencia (líneas 3963 a 3975).

7. Características de los elementos

Al escoger esta opción es posible tener acceso a la consulta de información particular sobre cada elemento dado su número atómico (líneas 15000 a 18020).

Aparece en pantalla la pregunta sobre el número atómico ; de esta manera, al seleccionar el valor de Z deseado, se presenta el nombre y símbolo del elemento, así como su configuración electrónica en su estado base, el término que le corresponde de acuerdo a su estado fundamental, la energía total, el primer potencial de ionización, el radio y la afinidad electrónica.

Los valores de las configuraciones electrónicas, de los radios por nivel, de los primeros potenciales de ionización y de las afinidades electrónicas para cada uno de los elementos aparecen registrados en los Anexos indicados en las secciones anteriores. Los términos del estado fundamental fueron consultadas del Volumen III del Alonso-Finn (5) y aparecen registrados en el Anexo C.

8. Salir

Cuando se opta por esta última alternativa (líneas 2440 a 2475) aparece en pantalla un mensaje que indica que se abandona el programa, seguido de una pantalla que indica que debe teclear la palabra SYSTEM para regresar al sistema operativo.

BIBLIOGRAFIA

- Ayala San Martín, Gerardo. Antologías para la actualización de los profesores de Enseñanza Media Superior. Computación I. Introducción a la Computación. México, UNAM-Porrúa, 1987.
- Mejía Espinosa Martín, Introducción al BASIC. México, Colegio de Ciencias y Humanidades-UNAM, 1989.
- Dirección General de Servicios de Cómputo Académico. Manuales, Textos, Artículos e Instructivos de apoyo a los Cursos. B 7000/B 6000 Series BASICA. México, DGSCA-UNAM, 1977. [Reference Manual de Burroughs Corporation publicado en Detroit, Michigan].
- Heilborn, John y Talbott, Ran. Commodore 64. Guía del usuario. México, OBSBORNE/Mc Graw-Hill, 1985.
- Microsoft Corporation. Microsoft GW-BASIC. User's Guide and User's Reference. US, Microsoft Corporation, 1987.

NOTAS

-
- 1 Para la configuración electrónica $Z \in [1, 104]$ consulté pp. 1/9 y pp. 1-10 de la 72nd Edición del Handbook of Chemistry and Physics, 1991-1992, y para $Z \in [105, 109]$ consulté el artículo "Relativistic Hartree-Fock-Slater Eigenvalues, radial expectation values, and potentials for atoms, $2 < Z < 126$ " de C. Carlson et al en el vol. 3, pp. 1-131 de 1971 en la revista Atomic Data.
- 2 Consultado del artículo "Relativistic Hartree-Fock-Slater Eigenvalues, radial expectation values, and potentials for atoms, $2 < Z < 126$ " de C. Carlson et al en el vol. 3, pp. 1-131 de 1971 en la revista Atomic Data.
- 3 Consultado en el Handbook of Chemistry and Physics, 72nd Edition, pp. 10-211 a pp. 10-212 de 1991-1992
- 4 Consultado en el Handbook of Chemistry and Physics, 72nd Edition, pp. 10-180 a pp. 10-181 de 1991-1992
- 5 Consultado del Alonso, Marcelo y Finn, Edward J.. Fundamental University Physics. Volume III Quantum and Statistical Physics. Addison-Wesley, EUA, pp. 168, 1986.

III. MODELOS PARA CALCULAR ENERGÍAS ATÓMICAS

Antecedentes

Uno de los problemas que enfrenta la Física es explicar cómo está estructurada la materia así como los cambios que ésta experimenta. Para ello se ha propuesto el uso de modelos que recuperan e interpretan la evidencia experimental que surge del estudio de estos fenómenos, se confrontan estos resultados con los que la realidad muestra y se hace una valoración del modelo que permite definir sus alcances, ventajas y limitaciones.

Sabemos que los modelos atómicos han experimentado una evolución y proporcionan un conocimiento, cada vez más amplio, sobre la composición y los cambios de la materia. Mediante el uso de estos modelos ha sido posible determinar algunas de sus propiedades, confrontar estos resultados con los que la realidad muestra y hacer una valoración del modelo que permita definir sus alcances, ventajas y limitaciones.

Niels Bohr (1913) aplicó las ideas cuánticas a la estructura atómica para obtener un modelo semiclásico que, a pesar de sus limitaciones, tiene las cualidades de constituir la transición a la Teoría Cuántica y, en especial, de poder explicar las líneas espectrales del átomo de hidrógeno.

Bohr formuló la existencia de estados estacionarios en el átomo y que éstos son permitidos solamente si el momento angular orbital L del electrón (1) es un múltiplo entero de $h/2\pi$, es decir,

$$L = mvr = n h/2\pi, \quad \text{con } n = 1,2,3,\dots \quad [\text{ec.A-1}]$$

en donde n es el **número cuántico principal**, m representa la masa del electrón, v su velocidad y r el radio de la órbita estacionaria, o bien expresándolo de acuerdo a la formulación de Sommerfeld:

$$L = \int_0^{2\pi} p \, d\theta$$

Además, Bohr postuló que los electrones pueden "saltar" de una órbita n_i a la órbita n_j , caracterizadas por las energías $E(n_i)$ y $E(n_j)$

1 Si " λ " es la longitud de onda de De Broglie asociada al electrón, $\lambda = h/mv$ y la condición de estabilidad de la órbita está dada por la necesidad de que la longitud de la órbita circular, $2\pi r$, sea igual a un número entero n de veces esa longitud de onda: $n \lambda = 2\pi r$

respectivamente, solamente cuando **absorben** o **emiten** una energía igual a

$$\Delta E = E(n_i) - E(n_j) = h \nu \quad [\text{ec. A-2}]$$

que es llamado un **cuanto de energía**.

Sin embargo este modelo no pudo explicar las intensidades relativas de las líneas espectrales observadas, ni el desdoblamiento de algunas de ellas por la aplicación de un campo magnético (efecto Zeeman), además de la limitación que tenía de poder aplicarse únicamente al átomo de hidrógeno o para iones con un solo electrón, llamados átomos hidrogenoides (He^+ , Li^{+2}).

Sommerfeld y Bohr trabajaron juntos en la formulación de un nuevo modelo (1916) en que consideraban órbitas estacionarias elípticas. Haciendo consideraciones relativistas, encontraron que la energía del electrón era ligeramente diferente para distintas órbitas elípticas, por lo que los niveles de energía del átomo estarán caracterizados por los números cuánticos principal n y secundario l . Explicaron que esta es la razón por la que las líneas espectrales que surgen al pasar un electrón entre los niveles con diferente valor de n , deben tener una estructura fina, es decir, esta línea deberá descomponerse en varias. Este resultado fue corroborado por Paschen con el espectro del helio.

El modelo Sommerfeld-Bohr siguió siendo incapaz de explicar el efecto Zeeman observado, esto es, la "sensibilidad" que mostraba el electrón ante la presencia de campos magnéticos. Este efecto estará asociado a un tercer número cuántico m llamado **número cuántico magnético**.

En 1924 Louis de Broglie propuso que la materia posee propiedades de onda y de partícula, cualidades que asocian a la materia una naturaleza dual. De esta manera asocia una **longitud de onda** λ a toda partícula de masa m que se mueve con una velocidad v y determinada por la siguiente expresión:

$$\lambda = h / mv \quad [\text{ec. A-3}]$$

Uhlenbeck y Goudsmith postularon que cada electrón, además de girar alrededor del núcleo, presenta un movimiento adicional: gira alrededor de su propio eje. El estudio del movimiento de rotación del electrón mostró que el módulo de su velocidad permanece constante y que solo tiene dos orientaciones posibles respecto al plano orbital o, mejor aún, respecto a la dirección del momento angular orbital; de este resultado se desprende que existían así solo dos posibilidades de giro. De esta manera Pauli propone un cuarto número cuántico, el **espín**, denotado por s , asignándole dos valores a su componente Z :

$$\frac{1}{2}\hbar \quad \text{y} \quad -\frac{1}{2}\hbar$$

En 1925 Wolfgang Pauli descubrió el principio fundamental que rige las configuraciones electrónicas de los átomos que tienen más de un electrón, el **Principio de Exclusión**, que establece la imposibilidad

de encontrar dos electrones en el mismo estado cuántico dentro de un átomo. Cada electrón en el átomo debe tener una serie diferente de **números cuánticos** (n, l, m_l, s).

Apoyado en la teoría propuesta por Bohr y en la naturaleza ondulatoria de la materia propuesta por De Broglie, Erwin Schrödinger (1926) asocia una longitud de onda con la materia, propone una **función de onda** $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, t)$ asociada a todo cuerpo tal que:

$$\psi^2 dV \quad \text{o} \quad \psi \cdot \psi^* dV$$

representa la probabilidad de encontrar al cuerpo dentro de un elemento de volumen dV en torno a la posición $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ en el instante t y ψ^* representa la función conjugada de ψ .

Así es como Schrödinger plantea una ecuación diferencial,

$$(\hbar/2\pi i) \cdot \delta\psi/\delta t = (\hbar^2/8\pi^2 m) (\delta^2\psi/\delta x^2 + \delta^2\psi/\delta y^2 + \delta^2\psi/\delta z^2) - E_p \psi$$

que relaciona la función de onda $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, t)$ con las energías potencial $E_p(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ y total E asociadas a la partícula de masa m . Las soluciones de tal ecuación dependerán de la expresión que corresponda a la energía potencial E_p de la partícula.

Para el caso particular del átomo de hidrógeno, es conocido que la función de onda ψ en la **ecuación de Schrödinger** (en coordenadas esféricas polares: longitud del radio vector, ángulo cenital y ángulo azimutal) puede expresarse como el producto de tres funciones diferentes, cada una de las cuales depende de una sola de estas tres variables y, de esta manera, es posible encontrar su solución.

Sin embargo, para átomos complejos (de más de un electrón, $Z > 1$) o energías potenciales menos simples que para el caso en que $Z=1$, la función de onda no es separable y no es posible resolver la ecuación de Schrödinger de manera directa; **es importante crear métodos que nos conduzcan a soluciones aproximadas.**

Entre los métodos que han sido utilizados pueden mencionarse el de Thomas-Fermi, el propuesto por Hartree y Fock, los de apantallamiento (en donde se supone el potencial que afecta a los electrones en un átomo complejo como un **potencial central debido al núcleo**, pero disminuido en una cierta proporción, efecto que se conoce como **apantallamiento**, y es debido a la interacción entre el electrón al que se le está determinando el potencial y el resto de los electrones del átomo) y los que podría llamar simplificados, como los propuestos por Sucher, Kregar y Weisskopf, y R. W. Gómez.

Con la intención de simplificar los cálculos trabajaré en adelante en unidades atómicas, esto es,

$$m = 1, e = 1, \hbar/2\pi = \hbar = 1$$

en donde "m" representa la masa del electrón, "e" su carga y "h" la constante de Planck.

En particular, la unidad de energía que utilizaré será el **Hartree** o **UAE** (unidad atómica de energía) la cual equivale a:

$$1 \text{ Hartree} = 1 \text{ UAE} = 27.210 \text{ eV} = 2 \text{ Ry} = 4.359 \times 10^{-18} \text{ J}$$

ya que $1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$.

De manera similar, la unidad atómica de longitud es el **radio de Bohr**, denotado por r_0 , y que equivale a:

$$1 r_0 = 5.3 \times 10^{-11} \text{ m}$$

A continuación presento, de manera sintética, en qué consisten los métodos propuestos por Thomas-Fermi, Hartree y Fock, Sucher, Weisskopf y Gómez, indicando primero las expresiones matemáticas generales y después simplificándolas al trabajar en unidades atómicas.

Método de Thomas-Fermi

En este método se considera un gas de electrones libres sobre los cuales no actúa fuerza alguna y que se mueven en una caja cúbica de potencial cuyas barreras se encuentran en:

$$x \in [0, A], \quad y \in [0, A] \quad \text{y} \quad z \in [0, A]$$

Se considera además que se tiene una densidad uniforme de material cargado positivamente a través de la caja y que esta densidad es justamente la necesaria para balancear la densidad de carga negativa promedio de los electrones.

La función de estado para un electrón libre dentro de la caja es:

$$u = \text{sen} \left(\frac{n_x \pi x}{A} \right) \text{sen} \left(\frac{n_y \pi y}{A} \right) \text{sen} \left(\frac{n_z \pi z}{A} \right) \quad [\text{ec. TF-1}]$$

La energía de un electrón con esta función de estado es:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{h^2}{8 \cdot m \cdot A^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad [\text{ec. TF-2}]$$

que en unidades atómicas quedará expresada como:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{1}{8 \cdot A^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad [\text{ec. TF-2}]$$

Si se considera un espacio en el cual n_x , n_y y n_z son las coordenadas rectangulares, existe una función de estado asociada con cada conjunto de valores positivos de las n o con cada volumen unitario en el primer octante de este espacio. La superficie de energía constante es una esfera de radio:

$$r = (8 \cdot m \cdot A^2 \cdot E_0 / h^2)^{1/2} = (8 \cdot A^2 \cdot E_0)^{1/2} \quad [\text{ec. TF-3}]$$

y el volumen de esta esfera en el primer octante es:

$$\text{Volumen} = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} r^3 = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} (8A^2 \cdot E_0)^{3/2}$$

$$\text{Volumen} = \frac{4}{3} A^3 (2 \cdot E_0) \quad [\text{ec. TF-4}]$$

Dado que para el conjunto de las n hay dos electrones, el número de electrones N con energía menor que E_0 es:

$$N = \frac{8}{3} A^3 (2 \cdot E_0)^{3/2}$$

$$N = \frac{8}{3} V (2 \cdot E_0)^{3/2} \quad [\text{ec. TF-5}]$$

en donde $V = A^3$ es el volumen del cubo. Si todos los estados de energía hasta E_0 están llenos, el número de electrones por unidad de volumen será

$$n = \frac{N}{V} = \frac{8\pi}{3} \cdot (2 \cdot E_0)^{3/2} \quad [\text{ec. TF-6}]$$

y la densidad de carga electrónica resulta:

$$\Gamma = \frac{8\pi e}{3} \cdot (2 \cdot E_0)^{3/2} \quad [\text{ec. TF-7}]$$

Las suposiciones en el modelo de Thomas-Fermi

Si $V(r)$ es el potencial electrostático en el punto r del átomo, entonces la energía potencial de un electrón en ese punto será

$$-e \cdot V(r) = -1 \cdot V(r) = -V(r)$$

y se considera que en ese punto existen electrones cuyas energías cinéticas varían desde cero hasta $V(r)$, de tal forma que los electrones con máxima energía cinética tienen una energía total igual a cero, esto es, apenas están retenidos en el átomo,

1º En estas condiciones, Thomas y Fermi supusieron que la densidad de carga de los electrones a una distancia r del núcleo quedaría determinada por esta energía cinética máxima, tal como sucedería en un gas de electrones libres que tuviesen la misma energía cinética máxima. En otras palabras, supusieron que la densidad de carga electrónica Γ era

$$\Gamma = \frac{8}{3} (2 \cdot V(r))^{3/2} \quad [\text{ec. TF-8}]$$

Sin embargo, en un átomo no existe una distribución uniforme de carga positiva.

2º Se aplica una condición de autoconsistencia: el potencial $V(r)$ debe estar determinado por la ecuación de Poisson para la densidad de carga Γ de los electrones y para la carga nuclear:

$$\text{grad}^2 V = -\Gamma / \epsilon_0 = \frac{8\pi}{3\epsilon_0} \cdot (2 \cdot V(r))^{3/2} \quad [\text{ec. TF-9}]$$

y el potencial $V(r)$ se puede escribir en la forma:

$$V(r) = \frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \cdot u(r)$$

que en unidades atómicas se expresa como:

$$V(r) = \frac{Z}{r} \cdot u(r) \quad [\text{ec. TF-10}]$$

en donde $u(r)$ es una función de apantallamiento del núcleo atómico debido a los electrones que lo rodean. Escribiendo

$$\varphi = u(r) \quad \text{y} \quad r = \frac{a_0 \cdot x}{4} \left(\frac{9 \cdot \pi^2}{2 \cdot Z} \right)^{1/3} \quad [\text{ec. TF-11}]$$

de donde la ecuación diferencial toma la forma:

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = \varphi^{3/2} \cdot x^{-1/2} \quad \text{y} \quad \begin{array}{l} \varphi = 1 \text{ en } x = 0 \\ \varphi = 0 \text{ en } x \rightarrow \infty \end{array} \quad [\text{ec. TF-12}]$$

Esta ecuación es la forma más común de la ecuación de Thomas-Fermi y no puede ser resuelta analíticamente, aunque existen soluciones numéricas de ella.

Limitaciones del modelo de Thomas-Fermi

La condición de una variación lenta en el potencial radial no proporciona buenos resultados para el caso de átomos con pocos electrones debido a que en estos casos tal aproximación es falsa; conforme aumenta el número atómico Z , este modelo coincide cada vez más con los resultados reales.

METODO DE HARTREE-FOCK

La aproximación de Hartree y Fock (1957) es un método para obtener funciones de onda totales para un sistema de muchos electrones. Este método ha sido aplicado con buenos resultados en muchas áreas de la Mecánica Cuántica, incluyendo sistemas atómicos y moleculares, así como en Estado Sólido.

El método está basado en una aproximación de campo central y en el Principio o Teorema Variacional en donde se consideran, a diferencia del modelo anterior, las configuraciones electrónicas de los elementos.

Las suposiciones en el modelo de Hartree y Fock

1° Supone que cada electrón se mueve en un potencial promedio central debido a los demás electrones

2° Se resuelve la ecuación de Schrödinger de un electrón que se mueve en ese potencial para obtener su función de estado φ

3° Con la función de estado ψ se calcula la densidad de carga debida al electrón

4° Se da la densidad de carga total debida a todos los electrones presentes en el átomo y se determina el potencial que esta densidad produce

5° Se calcula la nueva función de estado y se repite el procedimiento hasta que el potencial final concuerde con el anterior.

Con este procedimiento no cambia la dependencia angular y la única diferencia aparece en R_{nl} , la función de onda radial, y se obtienen los mismos tres números cuánticos n , l y m_l con su mismo significado. Una diferencia importante es que ahora la energía tendrá (aun sin corrección relativista o de interacción espín-órbita) una dependencia con l .

El problema es resolver

$$H\psi = E\psi$$

con

$$H = \sum_i H_0(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(r_i, r_j)$$

en donde, trabajando en unidades atómicas, se tiene que

$$H_0(r_i) = \frac{1}{2} \text{grad}^2(-Z/r_i)$$

y

$$V(r_i, r_j) = \frac{1}{|r_i - r_j|}$$

Como no sabemos la solución, proponemos que la función de estado ψ puede expresarse como:

$$\psi = \psi_1(r_1) \cdot \psi_2(r_2) \cdot \psi_3(r_3) \cdots \psi_n(r_n)$$

Al hacer esto se está suponiendo implícitamente que $V(r_i, r_j)$, o su suma, producen un potencial central; de otra manera, la ecuación diferencial no es separable. Aquí se presentan dos problemas, ya que no sabemos cuanto vale ψ ni cuanto vale $V(r_{ij})$.

Para poder resolver el problema, Hartree y Fock propusieron un método Variacional que consiste en calcular primero $\langle H \rangle$:

$$\langle H \rangle = \int_{\text{todo el espacio}} \psi^* (\sum H_0(r_i) + \frac{1}{2} \sum V(r_i, r_j)) \psi d\sigma$$

$$\langle H \rangle = \int_{\text{todo el espacio}} \psi^* (\sum H_0(r_i) \psi_1(r_1) \cdot \psi_2(r_2) \cdot \psi_3(r_3) \cdots \psi_n(r_n) + \frac{1}{2} \sum V(r_i, r_j)) \psi d\sigma$$

Ahora bien, si las $\psi_i(r_i)$ son eigenvalores de $H_0(r_i)$, entonces:

$$(\psi_1(r_1) \cdot \psi_2(r_2) \cdot \psi_3(r_3) \cdots \psi_n(r_n)) = E_i \psi$$

y esto implica que desde un principio se ha ignorado la repulsión electrónica para tomarla en cuenta después.

La única condición que se les pide a las $\psi_i(r_i)$ es que sean **ortogonales**, es decir,

$$\int_{\text{todo el espacio}} \psi_i^*(r_i) \cdot \psi_j(r_i) d\sigma = \delta_{ij}$$

De esta manera podemos expresar $\langle H \rangle$ como:

$$\langle H \rangle = \sum_i \int \psi_i(r_i) \cdot [H_0(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int \psi_j \cdot V(r_i, r_j) \psi_j d\sigma] \psi_i(r_i) d\sigma_i$$

Ahora bien, $\frac{1}{2} \sum \int \psi_j \cdot V(r_i, r_j) \psi_j d\sigma = V_{\text{ef}}(r_i)$

donde $V_{\text{ef}}(r_i)$ resulta ser un potencial promedio producido por $N-1$ electrones y que actúa sobre el electrón i . A este potencial le llamaremos V_{ef} y entonces

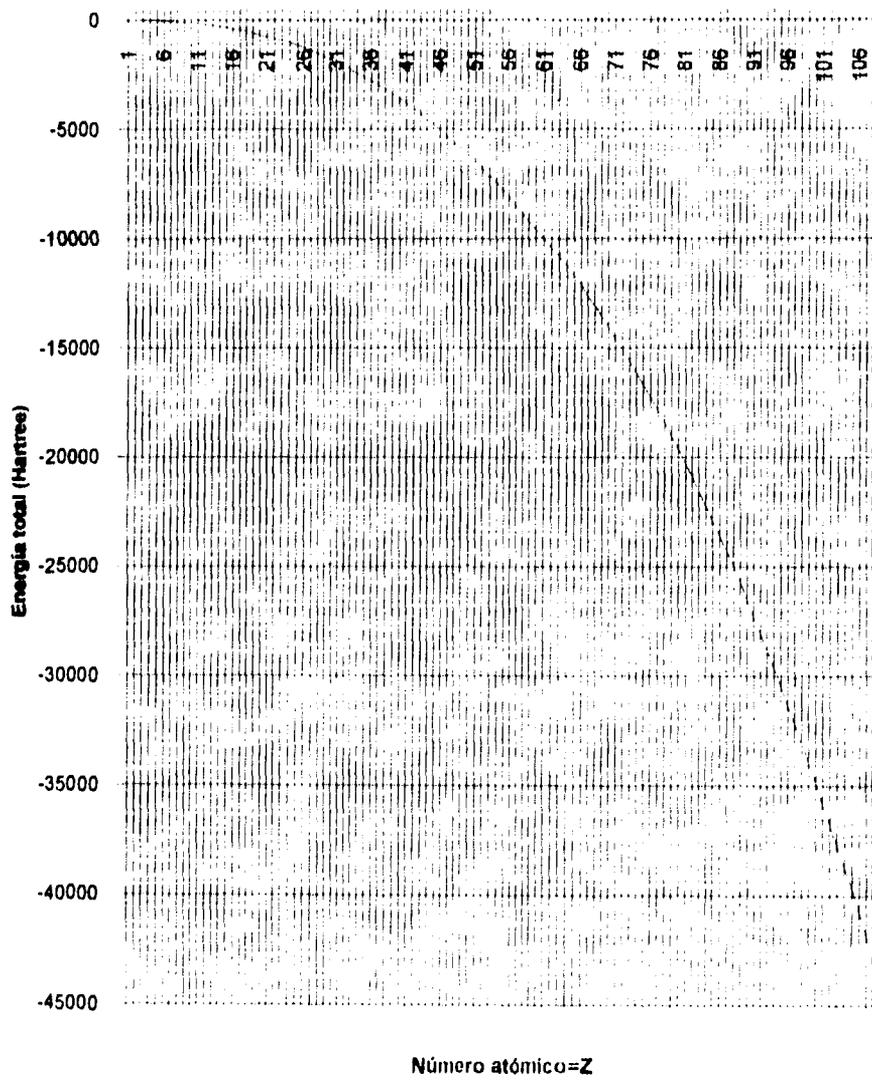
$$\langle H \rangle = \sum_i \int \psi_i(r_i) \cdot [H_0(r_i) + V_{\text{ef}}(r_i)] \psi_i(r_i) d\sigma_i$$

Si conociéramos $\psi_i(r_i)$ el problema ya estaría resuelto, pues sabríamos cuánto vale V_{ef} . Como no es así, se aplica el Teorema Variacional $\delta \langle H \rangle = 0$, en donde lo que se varía es a las funciones $\psi_i(r_i)$ que son desconocidas.

A continuación presento la gráfica que relaciona los **Números Atómicos (Z)** de los elementos con los valores de las **Energías Totales** que les corresponden en su estado base calculadas con el Método propuesto por Hartree y Fock, información que fue consultada en los artículos de Carlson y Bunge, así como en el libro de Froese que aparecen en la bibliografía en este capítulo.

En la parte final de este capítulo aparece una tabla de valores donde están registrados el número atómico (Z), el símbolo, la energía total y el radio correspondientes a cada uno de los 109 elementos calculados con el método propuesto por Hartree y Fock.

Gráfica de Energía total vs Z en el modelo Hartree-Fock



Método de Joseph Sucher

Este método proporciona mejores resultados que el de Thomas-Fermi y éstos coinciden prácticamente con los dados por Hartree-Fock con la ventaja de proporcionar un camino mucho más sencillo de recorrer. Esta es la razón principal para que el modelo propuesto por Sucher se considere como uno de los métodos más simplificados mediante el cual es posible determinar la energía de cualquier átomo en su estado base a partir de su número atómico Z .

El punto de partida es la observación elemental de que el eigenvalor E asociado a la eigenfunción ψ del Hamiltoniano H de muchos electrones no-relativistas está completamente determinado por los valores de:

$$\langle r_i^{-1} \rangle \equiv \langle | r_i^{-1} | \rangle \quad \text{y} \quad \langle r_{ij}^{-1} \rangle \equiv \langle | r_{ij}^{-1} | \rangle,$$

los valores medios inversos de las separaciones electrón-núcleo y electrón-electrón, respectivamente. Así,

$$H = K + V_{e-N} + V_{e-e}$$

donde K es el operador de la energía cinética, V_{e-N} y V_{e-e} son las energías potenciales debidas a las interacciones electrón-núcleo y electrón-electrón, respectivamente, y que están expresadas en unidades atómicas:

$$V_{e-N} = \sum_{i=1}^Z (-Z/r_i) \quad V_{e-e} = \sum_{i<j}^Z r_{ij}^{-1} \quad (\text{ec. S-1})$$

Aplicando el Teorema Virial se obtiene:

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle = \frac{1}{2} (E_{e-N} + E_{e-e}) \quad (\text{ec. S-2})$$

donde

$$E_{e-N} = \langle \psi | V_{e-N} | \psi \rangle \quad \text{y} \quad E_{e-e} = \langle \psi | V_{e-e} | \psi \rangle \quad (\text{ec. S-3})$$

Ya que la eigenfunción ψ es completamente antisimétrica, $\langle r_i^{-1} \rangle$ y $\langle r_{ij}^{-1} \rangle$ son independientes de los índices, podemos escribir:

$$\begin{aligned} E_{e-N} &= -Z^2 \langle r_i^{-1} \rangle \\ \text{y} \quad E_{e-e} &= Z(Z-1) \langle r_{ij}^{-1} \rangle \end{aligned} \quad (\text{ec. S-4})$$

Cálculo de $\langle r_i^{-1} \rangle$ y $\langle r_{ij}^{-1} \rangle$

Una primera aproximación de $\langle r_i^{-1} \rangle$ para un átomo de carga nuclear Z puede hacerse escribiendo el inverso del radio promedio $a_X^{-1}(Z)$ asociado con la capa $X = (n,l)$ como

$$a_X^{-1} = Z_X/n^2 \quad (\text{ec. S-5})$$

tomando Z_X como Z reducido en el número de electrones en las capas internas. Por tanto tomamos

$$\langle r_i^{-1} \rangle_{\text{aprox}} = \sum_X |N_X / Z| a_X^{-1} \quad (\text{ec. S-6})$$

donde N_X denota el número de electrones en la capa X y el subíndice "aprox" denota una primera aproximación a este valor. El valor de

$$\langle r_i^{-1} \rangle_{\text{aprox}}$$

resulta de la evaluación del extremo derecho de la ecuación (ec.S-6):

$$\langle r_i^{-1} \rangle_{\text{HF}} = \frac{-E_{\text{HF}}^{e-N}}{Z^2} \quad (\text{ec. S-7})$$

Sucher reporta que estos valores prácticamente coinciden con los calculados por Hartree y Fock, difiriendo en un pequeño porcentaje para todos los valores de Z alcanzando una diferencia máxima de un 6% para el neón ($Z=10$).

Para encontrar una estimación de $\langle r_{ij}^{-1} \rangle$ Sucher hizo tres aproximaciones distintas:

A1: la densidad de probabilidad de un electrón correspondiente a una órbita (n, l, m_l) en la capa X , promediada sobre m_l , está aproximada por la función delta concentrada sobre la esfera con un radio a_X dado por la ecuación (ec. S-5),

A2: se ignora totalmente la interacción de intercambio entre electrones en capas con diferentes valores de n y

A3: la interacción de intercambio entre electrones en capas con el mismo valor de n se aproximan por la correspondiente interacción directa.

El conocimiento de las funciones de densidad espacial de un solo electrón y dos electrones, $\Gamma(x)$ y $\Gamma(x, x')$, determina los valores de:

$$\langle r_i^{-1} \rangle \quad \text{y} \quad \langle r_{ij}^{-1} \rangle$$

$$\langle r_i^{-1} \rangle = \int |\vec{r}|^{-1} \cdot \Gamma(r) dr \quad (\text{ec. S-8})$$

$$\langle r_{ij}^{-1} \rangle = \int |\vec{r} - \vec{r}'|^{-1} \Gamma(r, r') dr dr'$$

La aproximación $\Gamma(x)$ y $\Gamma(x, x')$ por la forma en que tendrían si la función de onda está dada por un determinante de Slater. Entonces

$$\langle r_i^{-1} \rangle \approx \frac{1}{Z} \sum_a G_a$$

$$\langle r_{ij}^{-1} \rangle \approx \frac{1}{Z(Z-1)} \sum_{\alpha, \alpha'} (J_{\alpha, \alpha'} - \delta_{m_s, m_s'} K_{\alpha, \alpha'}) \quad (\text{ec. S-9})$$

donde $\alpha = (a, m_s)$ denotan un orbital espín ocupado con una función de onda espacial

$$\vartheta_a = \vartheta_{n,l,m_l}(r),$$

$$G_a = \int r^{-1} \Gamma_{aa}(r) dr \quad (\text{ec. S-10.a})$$

donde J y K son las integrales directa y de intercambio

$$J_{aa'} = \int |\vec{r} - \vec{r}'|^{-1} \Gamma_{aa}(r) \Gamma_{a'a'}(r) dr dr' \quad (\text{ec. S-10.b})$$

$$K_{aa'} = \int |\vec{r} - \vec{r}'|^{-1} \Gamma_{aa}(r) \Gamma_{a'a'}(r) dr dr' \quad (\text{ec. S-10.c})$$

con $\Gamma_{aa'}(r) = \vartheta_a(r) \cdot \vartheta_{a'}^*(r)$. Podemos ahora establecer nuestras suposiciones A1, A2 y A3 como sigue:

- * Reemplazamos $\Gamma_{aa'}(r)$ por G_a y $J_{aa'}$ por $\Gamma_X = \Gamma(r-a_X)/4\pi a_X^2$
- * Si $n \neq n'$ despreciamos $K_{aa'}$
- * Si $n' = n$, reemplazamos $K_{aa'}$ por $J_{aa'}$.

De estas tres obtenemos:

$$G_a \rightarrow G_a(0) = a_X^{-1}$$

$$J_{aa'} \rightarrow J_{aa'}(0) = \min(a_X^{-1}, a_{X'}^{-1})$$

$$K_{aa'} \rightarrow K_{aa'}(0) = \delta_{nn'} J_{aa'}(0)$$

La aproximación anterior contradice las ecuaciones (ec.S-10.a, ec.10.b y ec.10.c) para $\langle r_{ij}^{-1} \rangle$ y con un pequeño cálculo a:

$$\langle r_{ij}^{-1} \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{Z(Z-1)} \sum g_X^{-1} a_X \quad (\text{ec. S-11})$$

donde el factor de peso $g_X = g_X(Z)$ está dado por

$$g_X = \frac{1}{2} N_X \left[\begin{array}{cc} \text{"el mismo"} & \text{"diferente"} \\ N_X + 2 \sum_{a_X' < a_X} N_X & + 4 \sum_{a_X' < a_X} N_X' \end{array} \right] + \frac{1}{2} \delta \quad (\text{ec. S-12})$$

Aquí el superíndice "el mismo" (o "diferente") significan que la suma es solamente sobre capas con el mismo valor de n (o diferente) como la capa X , y δ es 0 o -1, si N_X es par o impar respectivamente. Para un átomo con solamente capas llenas, el primero de algunos valores de g están dados por:

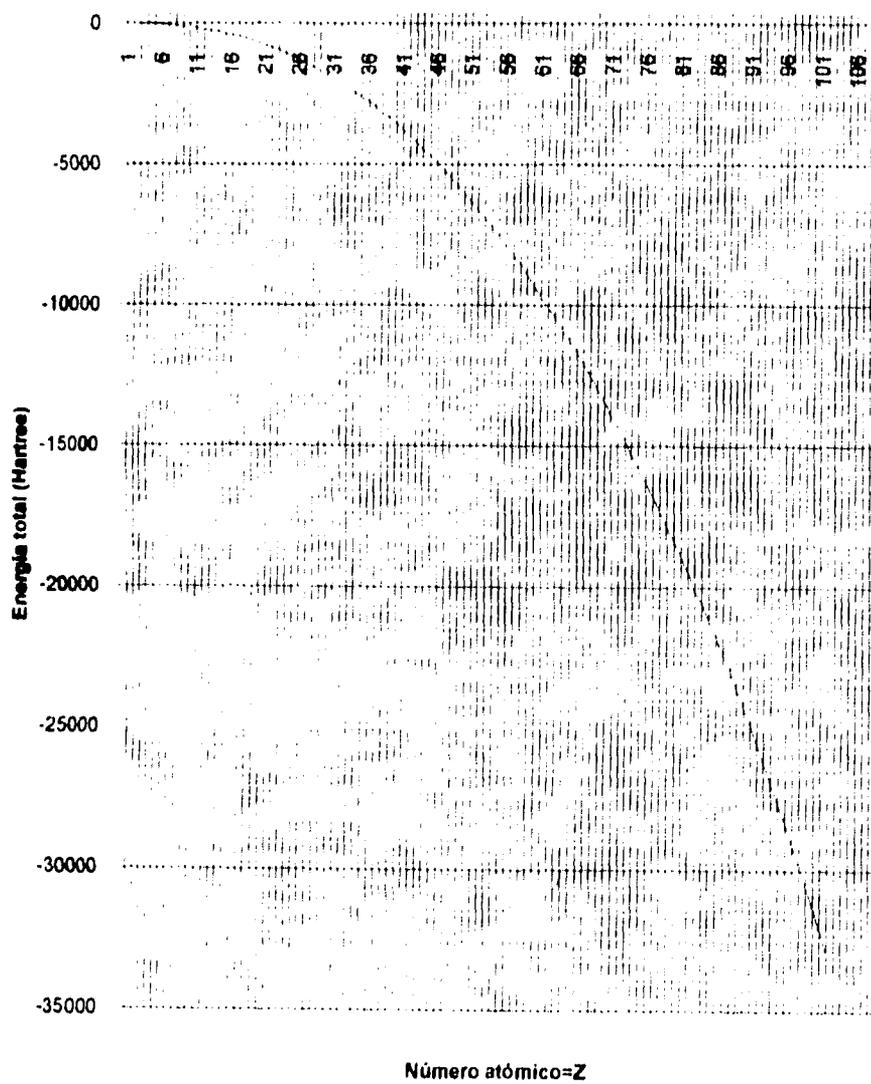
$$g_K=2, g_L=10, g_M=54, g_N=42 \text{ y } g_O=150.$$

Combinando las ecuaciones (ec.S-2) y (ec. S-4) obtenemos la expresión para la energía total:

$$E = (1/2) [E_{e-N} + E_{e-e}] = (1/2)[-Z^2 \langle r_i^{-1} \rangle + Z(Z-1) \langle r_{ij}^{-1} \rangle]$$

A continuación presento la gráfica que relaciona los Números Atómicos (Z) de los elementos con los valores de las Energías Totales que les corresponden en su estado base calculadas con el Método propuesto por Sucher. En la parte final de este capítulo aparece una tabla de valores que corresponde a la gráfica y que son reportados por Sucher en el artículo sobre la "Ground-state energy of any atom" que aparece en la bibliografía en este capítulo.

Gráfica de Energía total vs Z en el modelo de Sucher



METODO DE VICTOR F. WEISSKOPF

Otra alternativa que se puede usar es aplicar los métodos utilizados para el átomo de hidrógeno al estudio de átomos con varios electrones. Para el helio se tienen dos electrones con espín opuesto en el estado base considerándolos como una nube alrededor del núcleo con un radio promedio R . La energía E es entonces:

$$E = -\frac{4 e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{1,2}} + 2 \frac{h^2}{2 m R^2}$$

que en unidades atómicas queda de la siguiente manera:

$$E \approx -\frac{4}{R} + \frac{1}{r_{1,2}} + 2 \frac{1}{2 R^2} \quad (\text{ec.W-1})$$

El primer término es la energía potencial de los dos electrones en el campo debido al núcleo con carga $+2$; el segundo término es debido a la repulsión entre los electrones; y el tercer término representa la energía cinética de ambos electrones. Ya que R y $r_{1,2}$ aparecen siempre en el denominador, definimos R^{-1} como el promedio del recíproco de la distancia de los electrones desde el centro y $r_{1,2}^{-1}$ como el promedio del recíproco de la distancia entre ellos.

Weisskopf propone que $r_{1,2}$ pueda ser expresado como:

$$r_{1,2} = R/\mathcal{B}$$

con \mathcal{B} menor que la unidad, ya que $r_{1,2}$ será mayor que la distancia promedio R desde el centro.

Weisskopf escribe entonces a la energía (ec.W-1) para el helio en la forma:

$$E = -\frac{A}{R} + \frac{B}{2 \cdot R^2}, \quad \text{con } A = 4 - \mathcal{B} \quad \text{y } B=2 \quad (\text{ec.W-2})$$

Dado que la energía E debe ser un mínimo ($dE/dR=0$), los valores de E y R en términos de A y B quedan expresados como:

$$E = -A^2/2B, \quad R = B/A \quad (\text{ec.W-3})$$

Weisskopf encuentra para el helio que:

$$E = -(4 - \mathcal{B})^2 \frac{1}{4}, \quad R = \frac{2}{4 - \mathcal{B}} \quad (\text{ec.W-4})$$

donde falta encontrar los valores de $\mathcal{B} = R/r_{1,2}$.

Tanto R como $r_{1,2}$ dependen de la distribución electrónica $\Gamma(r)$, la densidad electrónica en la distancia $r_{1,2}$ medida desde el centro. El radio R está definido por:

$$\text{donde} \quad R^{-1} = \frac{\int (\Gamma/r) dx^3}{\int dx^3}$$

es una integración sobre todo el espacio.

$r_{1,2}$ puede encontrarse calculando la energía electrostática ε de dos nubes de electrones idénticas:

$$\Gamma(r): \quad \varepsilon = e^2 / r_{1,2}^3 = 1 / r_{1,2}^3$$

Este cálculo es simple pero largo, la mejor forma de hacerlo es calculando el potencial electrostático $U(r)$ producido por la distribución de carga:

$$e \Gamma(r) = 1 \cdot \Gamma(r) = \Gamma(r)$$

Entonces:

$$\varepsilon = \int dx^3 U(r) \Gamma(r) = \frac{e^2}{r_{1,2}}$$

que en unidades atómicas puede expresarse como:

$$\varepsilon = \int dx^3 U(r) \Gamma(r) = \frac{1}{r_{1,2}}$$

el cual determina $r_{1,2}$.

Una distribución de carga rectangular da $\mathcal{B} = 0.8$; una dependencia exponencial,

$$\exp(-r/b), \quad \text{lleva a } \mathcal{B} = 5/8 = 0.625$$

Mientras más se incrementa $\Gamma(r)$ hacia el centro, menor será \mathcal{B} . Si consideramos el caso del helio, la suposición más simple puede ser la distribución rectangular con $\mathcal{B} = 0.8$, la cual da una energía

en unidades atómicas de:

$$E = - (4 - \beta)^2 \frac{1}{4} = - (4 - 0.8)^2 \cdot (0.25) = (3.2)^2 \cdot (0.25) = 2.56$$

y un radio de:

$$R = \frac{2}{4 - \beta} = \frac{2}{4 - 0.8} = \frac{2}{3.2} = 0.625$$

Si la distribución cae exponencialmente con $\beta = 5/8 = 0.625$, entonces obtenemos:

$$E = - (4 - \beta)^2 \frac{1}{4}$$

$$E = - (4 - 0.625)^2 \cdot (0.25) = (3.375)^2 \cdot (0.25) = 2.85$$

y un radio de:

$$R = \frac{2}{4 - \beta} = \frac{2}{4 - 0.625} = \frac{2}{3.375} = 0.593$$

La energía calculada con $\beta = 5/8 = 0.625$ resulta más próxima a la determinada con el método de Hartree y Fock que con $\beta = 0.8$

Si consideramos ahora el caso de átomos con muchos electrones podemos generalizar la ecuación (ec.W-1) para átomos con Z electrones girando alrededor de una carga fija $Z \cdot e$. Por el método de Thomas-Fermi, podemos obtener la expresión:

$$E = - \frac{Z^2 \cdot e^2}{R} + \frac{Z \cdot (Z-1)}{2} \cdot \frac{e^2 \cdot \beta}{R} + Z \frac{h^2}{2 \cdot m \cdot R^2} (Z/2)^{2/3}$$

que en unidades atómicas quedará como:

$$E = - \frac{Z^2}{R} + \frac{Z \cdot (Z-1)}{2} \cdot \frac{\beta}{R} + Z \frac{1}{2 \cdot R^2} (Z/2)^{2/3} \quad (\text{ec.W-5})$$

El primer término es la energía potencial de Z electrones atraídos por el núcleo y R es la distancia promedio a la que éstos se encuentran medida desde el centro. El segundo término viene de la repulsión entre los electrones. Hay $Z \cdot (Z-1)/2$ pares, cada uno da lugar a una energía potencial:

$$V(r) = e^2 / r_{1,2}$$

o en unidades atómicas:

$$V(r) = 1/r_{1,2}$$

donde

$$r_{1,2} = R / B$$

es una distancia promedio entre los electrones, como en el caso del helio.

A partir de la ecuación (ec.W-5), si consideramos que para $Z \gg 1$, es decir, para átomos pesados, podemos aproximar $Z \cdot (Z-1)$ a Z^2 , es posible expresar la energía E como:

$$E = -\frac{Z^2}{R} + \frac{Z^2}{2} \frac{B}{R} + Z \frac{1}{2 \cdot R^2} (Z/2)^{2/3}$$

$$E = -Z^2 \frac{1}{R} \left[1 - \frac{B}{2} \right] + \frac{Z^{5/3}}{2 \cdot 2^{2/3} \cdot R^2} \quad (\text{ec.W-6})$$

que podemos escribir como:

$$E = -\frac{A}{R} + \frac{B}{2 \cdot R^2}, \text{ donde}$$

$$A = Z^2 \cdot 1 \frac{B}{2} \quad \text{y} \quad B = \frac{Z^{5/3}}{2^{2/3}} \quad (\text{ec.W-7})$$

Sabemos que el valor de E debe ser un mínimo, por lo que determinamos el valor de R derivando la expresión (ec.W-6) respecto a R, la igualamos a cero y encontramos el valor correspondiente de R:

$$R = \frac{B}{A}$$

Si sustituimos este valor en la ecuación (ec.W-6), encontramos la siguiente expresión para la energía:

$$E = -\frac{A}{R} + \frac{B}{2 \cdot R^2} = -\frac{A^2}{B} + \frac{A^2 \cdot B}{2 \cdot B^2} = \frac{-2 \cdot A^2 \cdot B + A^2 \cdot B}{2 \cdot B^2} = -\frac{A^2 \cdot B}{2 \cdot B^2}$$

$$E = -\frac{A^2}{2 \cdot B} = -\frac{[Z^2 \cdot (1 - B/2)]^2}{2 \cdot [Z^{5/3} \cdot 2^{-2/3}]} = [Z^{7/3} \cdot (1 - B/2)^2] / 2^{1/3}$$

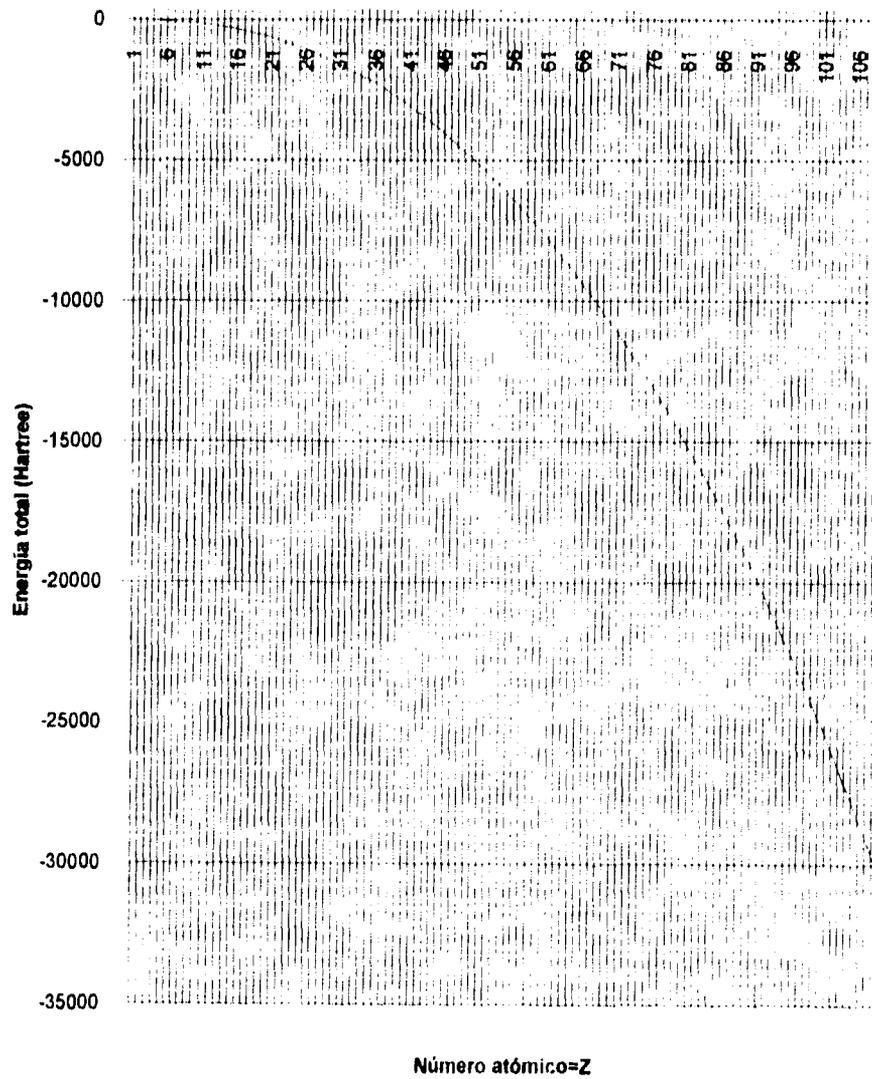
$$E = [Z^2 \cdot 333 \cdot (1 - B/2)^2] / 2^{1/3} = Z^2 \cdot 333 \cdot [(1 - B/2)^2 / 1.2599]$$

$$E = 0.7937 \cdot (1 - B/2)^2 \cdot Z^2 \cdot 333$$

La dificultad radica en conocer el valor de B el cual está determinado por la función de densidad electrónica que dependerá del elemento de que se trate.

A continuación presento la gráfica que relaciona los **Números Atómicos (Z)** de los elementos con los valores de las **Energías Totales** que les corresponden en su estado base calculadas con el Método propuesto por Weisskopf considerando que el valor de B es el propuesto por ($B = 5/8 = 0.625$), excepto para valores de Z pequeños ($B = 0.8$). La tabla de valores, al igual que para los modelos anteriores, aparece en al final de este capítulo.

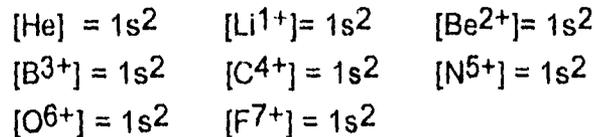
Gráfica de Energía total vs Z en el modelo de Weisskopf



METODO DE RAUL W. GOMEZ GONZALEZ

Dada la dificultad que representa la determinación de energías totales para los elementos, particularmente por la dificultad de cálculo que introduce el potencial de interacción entre los electrones, R. W. Gómez G. desarrolló un modelo sencillo que permite determinar éstas a partir de un argumento geométrico.

Primero consideraremos un caso particular, el de los átomos heliodes que son átomos que, al igual que el helio, poseen dos electrones en su última órbita como resultado de haberse ionizado al perder electrones. Los elementos heliodes son aquéllos que pueden formar iones que tengan la misma configuración electrónica que la del helio; por ejemplo podrían ser iones como el litio Li^+ , el berilio Be^{2+} , el boro B^{3+} , el carbono C^{4+} , el nitrógeno N^{5+} , el oxígeno O^{6+} y el flúor F^{7+} :



Consideraremos, desde un punto de vista clásico, la energía total de un átomo heliodes con número atómico Z . Si "m", "p" y "e" representan la masa, la cantidad de movimiento y la carga eléctrica del par de electrones del átomo y con vectores de posición

$$\vec{r}_1 \text{ y } \vec{r}_2$$

respecto al núcleo (ver figura 1) es:

$$E = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Z \cdot e^2}{r_2} - \frac{Z \cdot e^2}{r_1} + \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad (\text{G-1})$$

donde se ha sido ignorado la atracción y repulsión coulombianas entre las partículas.

En esta ecuación los dos primeros términos representan las energías cinéticas de cada uno de los dos electrones, el tercero y cuarto términos corresponden a las energías potenciales resultantes de la interacción entre cada electrón y el núcleo del átomo, y el último término es la energía debida a la interacción entre los dos electrones que se encuentran separados una distancia

$$|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|.$$

La energía cinética de cada electrón puede ser expresada en términos del módulo de su vector de posición

$$\vec{r}_i$$

si suponemos que, a fin de tener estados estacionarios, las longitudes de onda de De Broglie asociadas a los electrones se extiende sobre la órbita circular como ondas estacionarias cumpliendo la siguiente condición:

$$2 \pi r = n \cdot \lambda = \frac{n \cdot h}{p} \quad (G-2)$$

por lo que

$$p = \frac{n \cdot h}{2 \pi r} = \frac{n \cdot \hbar}{r} \quad (G-3)$$

Si se sustituye este resultado en la ecuación de la energía (G-1) obtenemos:

$$E = \frac{(n_1 \cdot \hbar / r)^2}{2 \cdot m} + \frac{(n_2 \cdot \hbar / r)^2}{2 \cdot m} - \frac{Z \cdot e^2}{r_1} - \frac{Z \cdot e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad (G-4)$$

Para el estado base de átomos helioides $n_1 = n_2 = 1$ y

$$|\vec{r}_1| = |\vec{r}_2| = |\vec{r}| = r,$$

por lo que la energía total es

$$E = \frac{\hbar^2}{m \cdot r^2} + \frac{2 \cdot Z \cdot e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad (G-5)$$

y el problema es estimar el término asociado con la repulsión interelectrónica.

Voy a hacerlo, por el momento, siguiendo la propuesta de Kregar y Weisskopf, es decir considerando que el potencial debido a la fuerza de repulsión por la interacción entre los electrones está determinado por un parámetro libre B como:

$$V_{ee} = \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} = e^2 / B \cdot r$$

por lo que la ecuación (G-5) queda de la forma:

$$E = \frac{\hbar^2}{m \cdot r^2} - \frac{2 \cdot Z \cdot e^2}{r} + \frac{e^2}{\beta \cdot r} \quad (\text{G-6})$$

Reescribiendo esta expresión en unidades atómicas tenemos:

$$E = \frac{1}{r^2} - \frac{2 \cdot Z}{r} + \frac{1}{\beta \cdot r} \quad (\text{G-7})$$

El valor de r está dado por la condición de que la energía total E debe ser un mínimo; esto es

$$\frac{dE}{dr} = -\frac{2}{r^3} + \frac{(2 \cdot Z \cdot \beta - 1)}{\beta \cdot r^2} = 0 \quad (\text{G-8})$$

de la cual obtenemos el valor de r :

$$r = \frac{2 \beta}{2Z \beta - 1} \quad (\text{G-9})$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (G-7), la energía total para el estado base para átomos helioides es obtenida:

$$E = -\frac{1}{2} \frac{(2 \cdot Z \cdot \beta - 1)^2}{2 \cdot \beta^2} = -E_0 \frac{(2 \cdot Z \cdot \beta - 1)^2}{2 \cdot \beta^2} \quad (\text{G-10})$$

donde E_0 es la energía de ionización del átomo de hidrógeno en unidades atómicas.

Ahora tenemos que determinar cuál es el valor del parámetro β . El valor de β puede calcularse o bien, es posible fijarse empíricamente obteniendo el valor experimental correspondiente para el estado base de energía. La alternativa que se va a seguir es una variante del primer caso: se calculará mediante un argumento geométrico simple.

Si consideramos a los dos electrones moviéndose en la misma "órbita atómica" de radio r (ver figura 1), debido a su repulsión mutua, es altamente improbable que los electrones estén muy cerca uno del otro. Respecto a uno de los electrones, el otro se mantendrá moviéndose en el hemicírculo a la posición del primero (ver figura 2), por lo que podemos considerar como argumento para determinar el valor esperado para la distancia entre los dos electrones como la diferencia entre los vectores de posición correspondientes a la distancia máxima y la mínima,

$$\langle |\vec{r}_2 - \vec{r}_1| \rangle = \langle |\vec{d}_{\text{máx}} - \vec{d}_{\text{mín}}| \rangle$$

que la distancia promedio entre los dos electrones es:

$$\langle |\vec{r}_2 - \vec{r}_1| \rangle = \langle |d_{\text{máx}} - d_{\text{mín}}| \rangle = \beta \cdot r = \frac{2 + \sqrt{2}}{2} = 1.7071 \quad (\text{G-11})$$

Al sustituir el valor de β en la ecuación para la energía total (G-10) encontraremos que:

$$E = - E_0 \cdot (3.4142 \cdot Z - 1)^2 = - (0.1464) \cdot (3.4142 \cdot Z - 1)^2$$

será la energía total del elemento heliide (por ejemplo Li^+ , Be^{2+} , B^{3+} , C^{4+} , N^{5+} , O^{6+} y F^{7+}) con número atómico Z y que está expresada en unidades atómicas o Hartrees.

Por ejemplo, para el He, con $Z=2$, la energía total expresada en unidades atómicas será de:

$$E_{\text{He}} = - (0.1464) \cdot (3.4142 \cdot Z - 1)^2 = - 2.9142$$

Consideraciones en el Modelo de R.W. Gómez G.:

1° Se trabaja en unidades atómicas, esto es, $m = e = h/2\pi = 1$

2° La generalización consiste en tomar la energía cinética T_x y la energía potencial V_x por capas

3° El potencial debido a la fuerza de repulsión por la interacción entre los electrones está determinado por un parámetro libre β como

$$V_{ee} = \beta/r_{1,2}$$

4° El parámetro β puede determinarse por consideraciones geométricas

Tomemos ahora el caso de un elemento con número atómico Z y carga nuclear Z^+ . Si consideramos la órbita n_x , la población electrónica quedará agrupada en dos regiones (ver figura 3):

* la que llamaremos de los **electrones internos** que se encuentran en las órbitas interiores a la órbita n_x

* la que llamaremos de los **electrones externos** que se encuentran de la órbita n_x hacia el exterior

Si llamamos T_x a la energía cinética de N_x electrones que se encuentran en la órbita n_x a una distancia R_x del núcleo, podemos expresarla como:

$$T_x = \frac{N_x \cdot n_x^2}{2 \cdot R_x^2}$$

De manera similar, la energía potencial V_x asociada a los electrones en la capa n_x estará dada por:

$$V_x = - \frac{N_x Z_x}{R_x}$$

con $Z_x = Z -$ electrones internos (ver figura 4).

Nuevamente tomaremos un parámetro β para ajustar la energía repulsiva entre los electrones, de tal forma que la repulsión interelectrónica es, en promedio:

$$V_{ee} = + \frac{\beta}{R_x}$$

y si existen N_x electrones en la capa n_x entonces la repulsión interelectrónica será:

$$V_{ee\ x} = \frac{N_x \cdot (N_x - 1) \cdot \beta}{2 \cdot R_x}$$

por lo que la energía total de la capa n_x será:

$$E_x = - \frac{N_x \cdot Z_x}{R_x} + \frac{N_x \cdot (N_x - 1) \cdot \beta}{2 \cdot R_x} + \frac{N_x \cdot n_x^2}{2 \cdot R_x^2}$$

Puesto que la energía en cada estado debe ser mínima, entonces el valor de R_x debe ser tal que $dE_x/dR_x = 0$, condición que nos permite encontrar el valor de R_x para el cual E_x será mínima:

$$R_x = \frac{2 \cdot n_x^2}{2 \cdot Z_x - (N_x - 1) \cdot \beta}$$

que al sustituirse en la expresión para E_x resulta:

$$E_x = -[2 \cdot Z_x \cdot N_x - (1 - N_x) \cdot N_x \cdot \beta]^2 / 8 \cdot n_x^2 N_x$$

Por lo tanto la energía del elemento en el nivel n_x es:

$$E_x = - \frac{[2 Z_x \cdot N_x - N_x \cdot (N_x - 1) \cdot B]^2}{8 N_x \cdot n_x^2}$$

y en consecuencia, la energía total E_{total} del átomo es:

$$E_{total} = \sum_x E_x = - \sum_x \frac{[2 Z_x \cdot N_x - N_x \cdot (N_x - 1) \cdot B]^2}{8 N_x \cdot n_x^2}$$

Sin embargo podemos considerar que el valor calculado para el caso del helio es representativo del efecto repulsivo de cada subcapa y por esta razón podemos afirmar que en principio este modelo puede ser aplicado para el resto de los elementos. Para determinar los valores numéricos de las variables involucradas al determinar E_x y E_{total} a partir del valor dado para Z , deberemos conocer la configuración electrónica del elemento para encontrar Z_x y N_x , para cada n_x .

Desarrollaré algunos ejemplos para mostrar cuáles son las consideraciones particulares que deben hacerse para el cálculo de las energías por nivel y totales de los elementos seleccionados, de acuerdo a la configuración electrónica del elemento se determinará el número de electrones en el nivel n_x de que se trate, el número de electrones exteriores N_x :

Sodio (Metal alcalino)

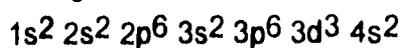
| Configuración electrónica: | | 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹ | | |
|----------------------------|-------|---|-------|------------------|
| Z | n_x | N_x | Z_x | E_x (Hartrees) |
| 11 | 1 | 2 | 11 | -114.642 |
| | 2 | 8 | 9 | -48.299 |
| | 3 | 1 | 1 | -0.056 |
| ENERGIA TOTAL: | | | | -162.997 |

Cloro (No-Metal, Halógeno)

| Configuración electrónica: | | 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁵ | | |
|----------------------------|-------|---|-------|------------------|
| Z | n_x | N_x | Z_x | E_x (Hartrees) |
| 17 | 1 | 2 | 17 | -279.127 |
| | 2 | 8 | 15 | -167.696 |
| | 3 | 7 | 7 | -10.689 |
| ENERGIA TOTAL: | | | | -457.512 |

Vanadio (metal de transición)

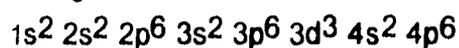
Configuración electrónica:



| Z | n_x | N_x | Z_x | E_x (Hartrees) |
|----------------|-------|-------|-------|------------------|
| 23 | 1 | 2 | 23 | -515.613 |
| | 2 | 8 | 21 | -359.093 |
| | 3 | 18 | 13 | -61.983 |
| | 4 | 2 | 2 | -0.182 |
| ENERGIA TOTAL: | | | | -936.871 |

Kriptón (Gas Inerte)

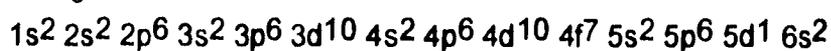
Configuración electrónica:



| Z | n_x | N_x | Z_x | E_x (Hartrees) |
|----------------|-------|-------|-------|------------------|
| 36 | 1 | 2 | 36 | -1274.997 |
| | 2 | 8 | 34 | -1020.786 |
| | 3 | 18 | 26 | -441.875 |
| | 4 | 8 | 8 | -8.850 |
| ENERGIA TOTAL: | | | | -2746.508 |

Gadolinio (lantánido, tierra rara)

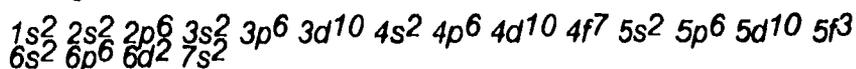
Configuración electrónica:



| Z | n_x | N_x | Z_x | E_x (Hartrees) |
|----------------|-------|-------|-------|------------------|
| 64 | 1 | 2 | 64 | -4058.595 |
| | 2 | 8 | 62 | -3593.972 |
| | 3 | 18 | 54 | -2403.040 |
| | 4 | 25 | 36 | -655.698 |
| | 5 | 9 | 11 | -13.489 |
| | 6 | 2 | 2 | -0.081 |
| ENERGIA TOTAL: | | | | -10724.875 |

Uranio (actínido, tierra rara)

Configuración electrónica:



| Z | n_x | N_x | Z_x | E_x (Hartrees) |
|----|-------|-------|-------|------------------|
| 92 | 1 | 2 | 92 | -8410.193 |
| | 2 | 8 | 90 | -7735.158 |
| | 3 | 18 | 82 | -5932.206 |
| | 4 | 32 | 64 | -3016.241 |
| | 5 | 21 | 32 | -287.032 |
| | 6 | 9 | 11 | -9.368 |
| | 7 | 2 | 2 | -0.059 |

ENERGIA TOTAL: -25390.257

La tabla de valores que relaciona los **Números Atómicos (Z)** de los elementos con los valores de las **Energías Totales** que les corresponden en su estado base calculadas con el Método propuesto por R. W. Gómez aparece al final de este capítulo y una segunda tabla de valores en donde se puede apreciar para cada uno de los elementos su **configuración electrónica**, el nivel u **órbita** y el **número de electrones en cada una de ellas**, el **número de electrones externos**, así como la **energía total asociada a cada elemento**, información que aparece en el Anexo D. El análisis de la gráfica realizado por medio de la técnica de regresión lineal que me permitió encontrar el modelo matemático que relaciona el número atómico **Z** de los 109 elementos con el valor de la energía total en el estado base **E** se encuentra desarrollado en el Anexo E.

La gráfica que relaciona el número atómico **Z** de los 109 elementos con el valor de su energía total **E** en el estado base aparece a continuación. El modelo matemático que relaciona estas la energía total **E** en unidades atómicas con el número atómico **Z** es:

$$E = - 0.533714 * Z^{2.3827}$$

donde encontré que su coeficiente de correlación

$$\text{Coef. de Correlación} = R = 0.999989 \approx 1$$

lo que indica que el modelo matemático es confiable.

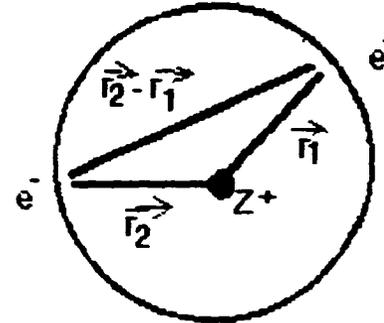


Figura 1 Posiciones relativas entre un par de electrones

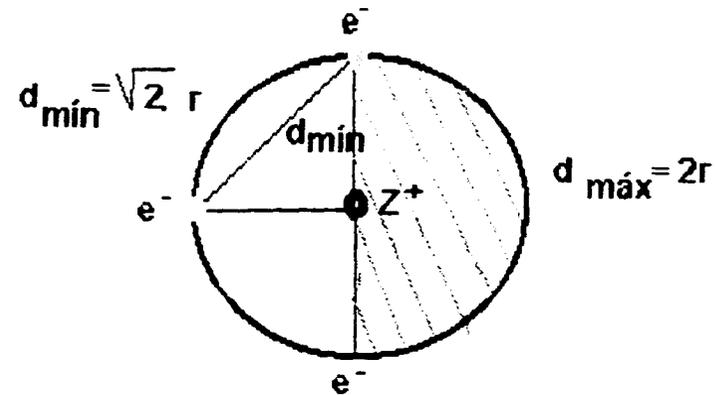


Figura 2 Posiciones relativas entre un par de electrones

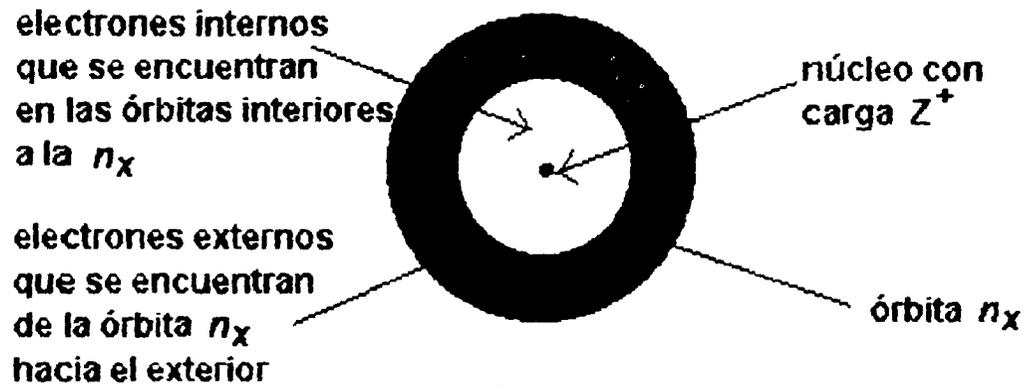


Figura 3

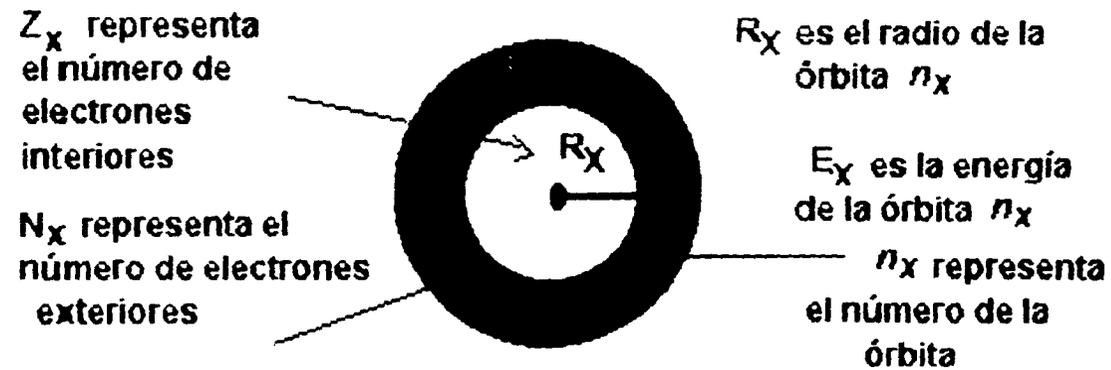


Figura 4

Como he mostrado a lo largo de este Capítulo existen diferentes métodos que se han desarrollado para encontrar propiedades atómicas asociadas diferentes sistemas atómicos, en especial a las propiedades atómicas y, las energías en el estado base de cada uno de los elementos entre ellas. Dependiendo de cual sea la precisión que se necesite, será la decisión que habrá de tomarse para seleccionar el Método más adecuado.

Una de las características que distingue el método propuesto por R. Gómez de otros modelos es la sencillez de los cálculos a partir de una consideración geométrica proporcionando resultados con bastante precisión. Por estas razones tomé la decisión de utilizar este modelo para que pudieran ser calculadas las energías por nivel y total de cada uno de los 109 elementos en el Programa de Cómputo Educativo que desarrollé para este trabajo.

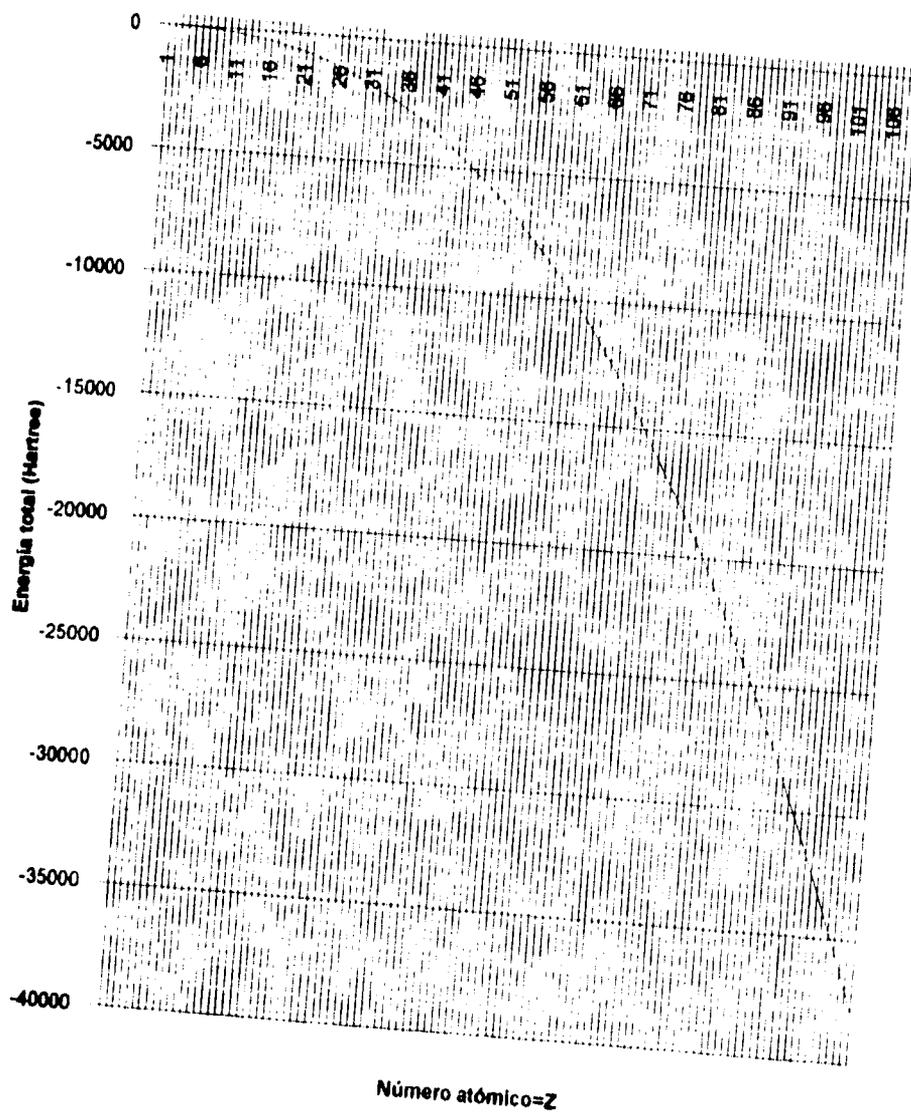
Otra de las diferencias que sobresale de los modelos de Thomas-Fermi, Sucher y Weisskopf es que Gómez considera la configuración electrónica de los diferentes elementos, cuando los otros la ignoran y llegan a hacer aproximaciones adicionales para proponer una supuesta densidad electrónica dando un modelo aproximado de la distribución de los electrones en el átomo.

En el Método seguido por Hartree y Fock también sustenta sus cálculos en el conocimiento de la configuración electrónica de los elementos, pero requiere de un manejo mucho más especializado de las Matemáticas y un conocimiento más especializado en la computación. Este método tiene una ventaja significativa sobre los demás: permite determinar otras propiedades con un alto grado de confiabilidad.

Para mostrar que los resultados reportados por Sucher, Hartree y Fock, Weisskopf y Gómez coinciden numéricamente de manera general (1), presento la gráfica que relaciona la **energía total E** con el **número atómico Z** en el que se traslapan los resultados obtenidos por los 4 métodos y en que se puede verificar que esta afirmación es verdadera.

1 Los valores correspondientes al Método propuesto por Thomas y Fermi no se incluyeron, dado que en las fuentes en donde consulté sobre los trabajos realizados por ellos en este campo, no proporcionan los valores de las energías totales para los elementos.

Gráfica de Energía total vs Z en el modelo de Gómez



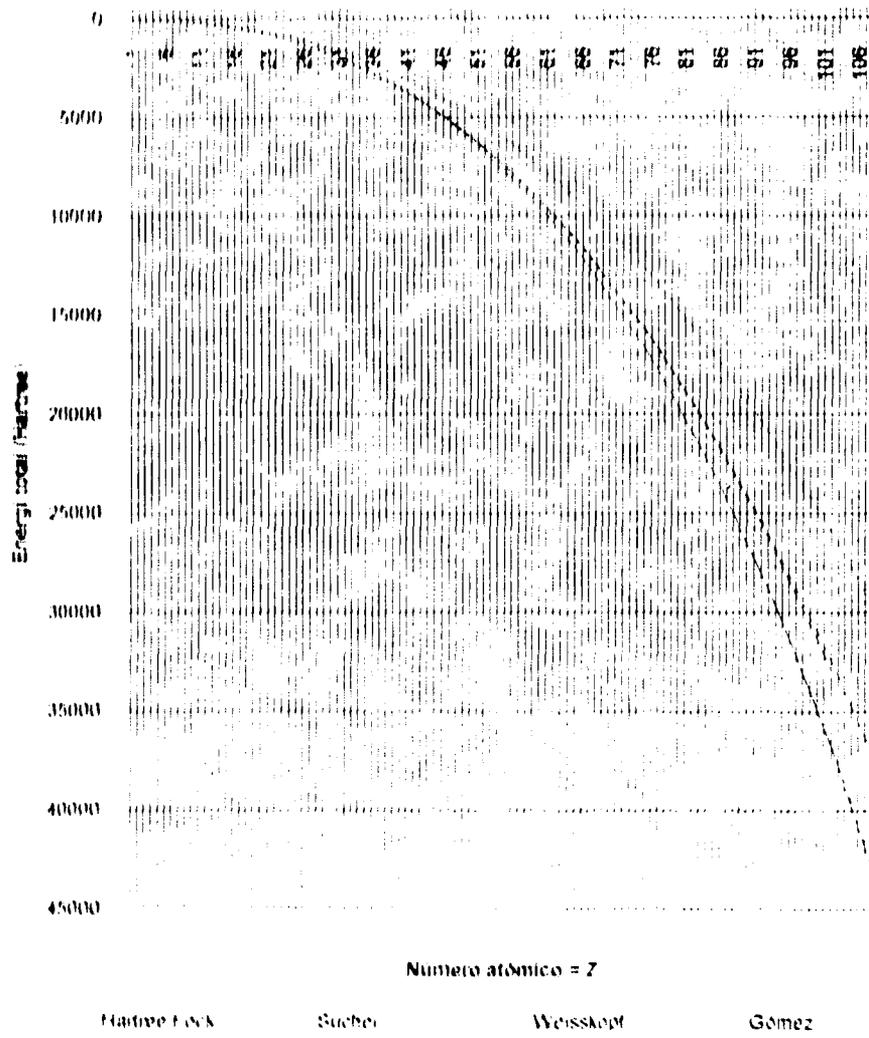
Comparación de las Energías Totales de los elementos con Z en [1,20]
 experimentales y los calculados a partir de los modelos de
 Hartree-Fock, Sucher, Weisskopf y Gómez

| Elemento | | Ettotal | Ettotal | Ettotal | Ettotal | Ettotal |
|----------|----|-----------|--------------|-----------|-----------|-----------|
| Símt | Z | exp | Hartree-Fock | Sucher | Weisskopf | Gómez |
| | | (Hartree) | (Hartree) | (Hartree) | (Hartree) | (Hartree) |
| H | 1 | -0.500 | -0.500 | -0.500 | -0.286 | -0.500 |
| He | 2 | -2.903 | -2.801 | -3.000 | -1.440 | -2.914 |
| Li | 3 | -7.478 | -7.192 | -7.623 | -6.927 | -7.453 |
| Be | 4 | -14.669 | -14.234 | -14.750 | -13.555 | -14.471 |
| B | 5 | -24.659 | -24.061 | -24.620 | -22.815 | -24.343 |
| C | 6 | -37.856 | -37.100 | -37.750 | -34.911 | -37.442 |
| N | 7 | -54.612 | -53.645 | -54.880 | -50.024 | -54.146 |
| O | 8 | -75.091 | -73.963 | -76.250 | -68.311 | -74.828 |
| F | 9 | -99.807 | -98.523 | -102.900 | -89.918 | -99.863 |
| Ne | 10 | -129.051 | -127.596 | -134.800 | -114.978 | -129.627 |
| Na | 11 | -162.429 | -160.775 | -168.800 | -143.614 | -162.997 |
| Mg | 12 | -200.310 | -198.488 | -207.100 | -175.942 | -200.579 |
| Al | 13 | -242.713 | -240.714 | -249.700 | -212.071 | -242.540 |
| Si | 14 | -289.869 | -287.683 | -296.900 | -252.104 | -289.047 |
| P | 15 | -342.242 | -339.557 | -348.900 | -296.137 | -340.267 |
| S | 16 | -399.037 | -396.502 | -406.000 | -344.265 | -396.367 |
| Cl | 17 | -461.419 | -458.685 | -468.500 | -396.577 | -457.512 |
| Ar | 18 | -529.114 | -517.173 | -536.400 | -453.157 | -523.870 |
| K | 19 | -601.970 | -598.930 | -608.700 | -514.089 | -594.948 |
| Ca | 20 | -680.107 | -676.975 | -686.500 | -579.451 | -671.035 |
| Sc | 21 | | -760.494 | -770.300 | -649.319 | -753.731 |
| Ti | 22 | | -849.788 | -860.000 | -723.768 | -842.287 |
| V | 23 | | -945.012 | -956.100 | -802.869 | -936.871 |
| Cr | 24 | | -1046.295 | -1059.000 | -886.691 | -1039.452 |
| Mn | 25 | | -1153.882 | -1168.000 | -975.303 | -1144.784 |
| Fe | 26 | | -1267.788 | -1285.000 | -1068.769 | -1258.449 |
| Co | 27 | | -1388.256 | -1410.000 | -1167.154 | -1378.806 |
| Ni | 28 | | -1515.414 | -1540.000 | -1270.519 | -1506.025 |
| Cu | 29 | | -1649.462 | -1674.000 | -1378.927 | -1643.202 |
| Zn | 30 | | -1790.424 | -1813.000 | -1492.435 | -1781.708 |
| Ga | 31 | | -1938.145 | -1959.000 | -1611.102 | -1926.428 |
| Ge | 32 | | -1982.593 | -2111.000 | -1734.985 | -2077.455 |
| As | 33 | | -2254.612 | -2270.000 | -1864.139 | -2234.882 |

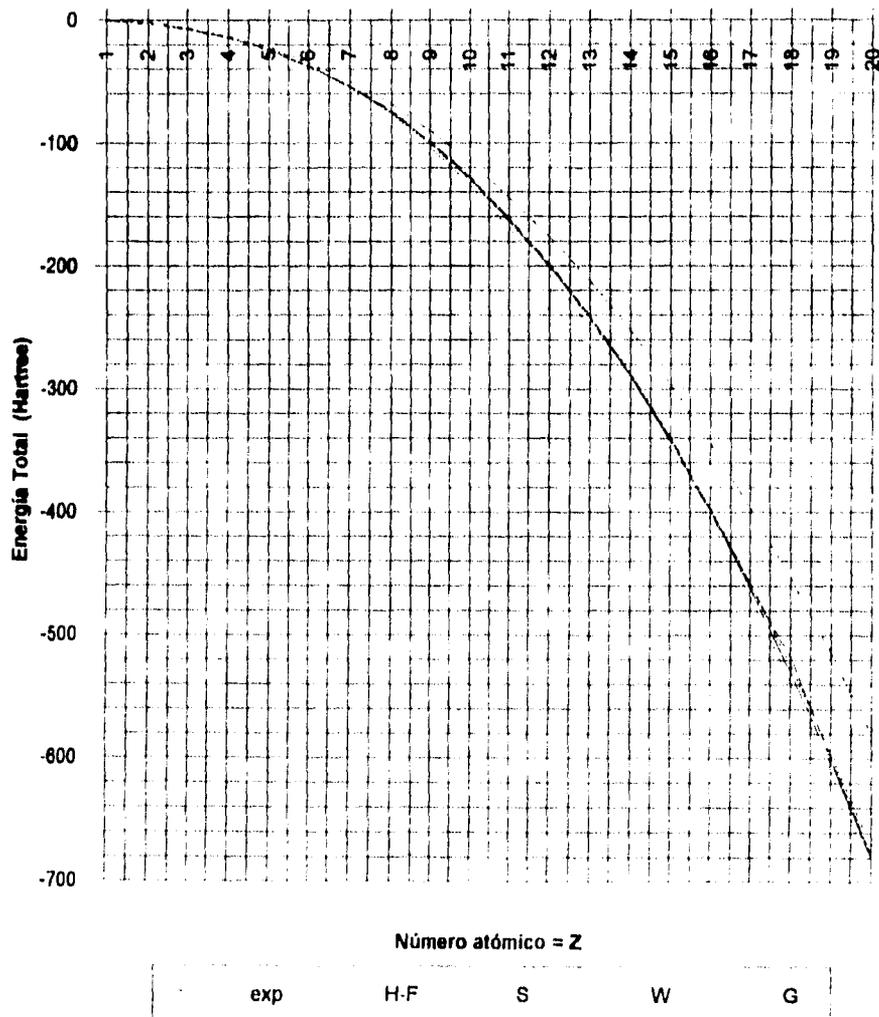
| Elemento | | Etotal exp (Hartree) | Etotal Hartree-Fock (Hartree) | Etotal Sucher (Hartree) | Etotal Weisskopf (Hartree) | Etotal Gómez (Hartree) |
|----------|----|----------------------------|-------------------------------------|-------------------------------|----------------------------------|------------------------------|
| Simt | Z | | | | | |
| Se | 34 | | -2423.560 | -2435.000 | -1998.618 | -2398.805 |
| Br | 35 | | -2599.799 | -2607.000 | -2138.476 | -2569.315 |
| Kr | 36 | | -2783.438 | -2785.000 | -2283.765 | -2746.508 |
| Rb | 37 | | -2974.185 | -2970.000 | -2434.536 | -2930.108 |
| Sr | 38 | | -3172.279 | -3162.000 | -2590.840 | -3120.285 |
| Y | 39 | | -3377.814 | -3361.000 | -2752.725 | -3317.918 |
| Zr | 40 | | -3590.971 | -3567.000 | -2920.241 | -3522.597 |
| Nb | 41 | | -3811.860 | -3780.000 | -3093.435 | -3735.310 |
| Mo | 42 | | -4040.689 | -4001.000 | -3272.355 | -3954.474 |
| Tc | 43 | | -4277.494 | -4229.000 | -3457.045 | -4179.851 |
| Ru | 44 | | -4522.489 | -4465.000 | -3647.552 | -4414.895 |
| Rh | 45 | | -4775.680 | -4710.000 | -3843.921 | -4656.340 |
| Pa | 46 | | -5037.292 | -4961.000 | -4046.195 | -4906.579 |
| Ag | 47 | | -5307.322 | -5219.000 | -4254.418 | -5162.165 |
| Cd | 48 | | -5585.845 | -5483.000 | -4468.633 | -5424.953 |
| In | 49 | | -5872.767 | -5756.000 | -4688.882 | -5695.003 |
| Sn | 50 | | -6168.293 | -6037.000 | -4915.206 | -5972.374 |
| Sb | 51 | | -6472.511 | -6327.000 | -5147.648 | -6257.126 |
| Te | 52 | | -6785.522 | -6624.000 | -5386.246 | -6549.320 |
| I | 53 | | -7107.452 | -6931.000 | -5631.041 | -6849.016 |
| Xe | 54 | | -7438.378 | -7245.000 | -5882.073 | -7156.273 |
| Cs | 55 | | -7778.100 | -7569.000 | -6139.381 | -7470.917 |
| Ba | 56 | | -8126.853 | -7902.000 | -6403.002 | -7793.059 |
| La | 57 | | -8484.722 | -8243.000 | -6672.976 | -8123.253 |
| Ce | 58 | | -8852.067 | -8594.000 | -6949.339 | -8468.107 |
| Pr | 59 | | -9229.111 | -8955.000 | -7232.130 | -8828.858 |
| Nd | 60 | | -9616.041 | -9324.000 | -7521.384 | -9191.756 |
| Pm | 61 | | -10012.935 | -9697.000 | -7817.137 | -9563.626 |
| Sm | 62 | | -10419.944 | -10077.000 | -8119.427 | -9944.562 |
| Eu | 63 | | -10822.010 | -10465.000 | -8428.288 | -10334.650 |
| Gd | 64 | | -11249.167 | -10861.000 | -8743.755 | -10724.870 |
| Tb | 65 | | -11687.000 | -11265.000 | -9065.864 | -11142.700 |
| Dy | 66 | | -12135.828 | -11678.000 | -9394.649 | -11560.840 |
| Ho | 67 | | -12611.780 | -12099.000 | -9730.143 | -11988.510 |
| Er | 68 | | -13082.564 | -12529.000 | -10072.380 | -12425.810 |
| Tm | 69 | | -13561.021 | -12967.000 | -10421.394 | -12872.840 |
| Yb | 70 | | -14057.766 | -13414.000 | -10777.219 | -13329.680 |
| Lu | 71 | | -14562.407 | -13869.000 | -11139.886 | -13784.250 |
| Hf | 72 | | -15078.480 | -14333.000 | -11509.427 | -14247.490 |
| Ta | 73 | | -15606.163 | -14805.000 | -11885.877 | -14719.470 |

| Elemento | | Etotal exp (Hartree) | Etotal Hartree-Fock (Hartree) | Etotal Sucher (Hartree) | Etotal Weisskopf (Hartree) | Etotal Gómez (Hartree) |
|----------|-----|----------------------------|-------------------------------------|-------------------------------|----------------------------------|------------------------------|
| Simt | Z | | | | | |
| W | 74 | | -16145.578 | -15287.000 | -12269.265 | -15200.230 |
| Re | 75 | | -16696.878 | -15778.000 | -12659.623 | -15689.840 |
| Os | 76 | | -17260.192 | -16278.000 | -13056.984 | -16188.360 |
| Ir | 77 | | -17835.752 | -16786.000 | -13461.377 | -16695.850 |
| Pt | 78 | | -18423.690 | -17305.000 | -13872.834 | -17213.330 |
| Au | 79 | | -19024.205 | -17831.000 | -14291.385 | -17739.030 |
| Hg | 80 | | -19637.390 | -18365.000 | -14717.059 | -18272.750 |
| Tl | 81 | | -20263.239 | -18910.000 | -15149.888 | -18815.280 |
| Pb | 82 | | -20902.014 | -19463.000 | -15589.901 | -19366.670 |
| Bi | 83 | | -21553.907 | -20026.000 | -16037.127 | -19926.960 |
| Po | 84 | | -22219.143 | -20598.000 | -16491.595 | -20496.190 |
| At | 85 | | -22897.856 | -21181.000 | -16953.335 | -21074.390 |
| Rn | 86 | | -23590.038 | -21772.000 | -17422.375 | -21661.630 |
| Fr | 87 | | -24296.097 | -22374.000 | -17898.743 | -22257.760 |
| Ra | 88 | | -25016.084 | -22985.000 | -18382.469 | -22862.880 |
| Ac | 89 | | -25750.485 | -23607.000 | -18873.579 | -23477.350 |
| Th | 90 | | -26499.053 | -24238.000 | -19372.103 | -24101.020 |
| Pa | 91 | | -27262.643 | -24880.000 | -19878.066 | -24742.800 |
| U | 92 | | -28040.865 | -25532.000 | -20391.498 | -25390.250 |
| Np | 93 | | -28835.472 | -26221.000 | -20912.425 | -26047.610 |
| Pu | 94 | | -29644.905 | -26922.000 | -21440.875 | -26720.050 |
| Am | 95 | | -30470.978 | -27633.000 | -21976.873 | -27397.640 |
| Cm | 96 | | -31313.188 | -28354.000 | -22520.448 | -28079.650 |
| Bk | 97 | | -32161.277 | -29085.000 | -23071.625 | -28783.130 |
| Cf | 98 | | -33048.355 | -29826.000 | -23630.430 | -29491.140 |
| Es | 99 | | -33941.747 | -30578.000 | -24196.890 | -30209.420 |
| Fm | 100 | | -34852.805 | -31340.000 | -24771.031 | -30938.020 |
| Md | 101 | | -35782.554 | -32113.000 | -25352.879 | -31677.010 |
| No | 102 | | -36730.851 | -32895.000 | -25942.458 | -32426.430 |
| Lw | 103 | | -37697.601 | | -26539.795 | -33178.750 |
| Ku | 104 | | -38683.452 | | -27144.915 | -33940.820 |
| Ha | 105 | | -39689.152 | | -27757.843 | -34712.670 |
| Unh | 106 | | -40712.032 | | -28378.603 | -35494.350 |
| Uns | 107 | | -41758.473 | | -29007.222 | -36285.900 |
| Uno | 108 | | -42825.981 | | -29643.722 | -37087.360 |
| Une | 109 | | -43915.205 | | -30288.130 | -37898.780 |

Gráficas de Energía total vs Z en los modelos de Hartree-Fock,
Sucher, Weisskopf y Gómez



Gráfica de Energía total vs Z experimental y con los modelos de Hartree-Fock, Sucher, Weisskopf y Gómez para Z en [1,20]



IV. CONCLUSIONES

La computadora ha mostrado ser una buena alternativa para facilitar y mejorar la calidad de la enseñanza y del aprendizaje en muchas áreas del conocimiento como puede confirmarse en la información que se muestra en la investigación que realicé. Se trata de un recurso didáctico que presenta una mayor versatilidad en su uso y aplicación que el común de los materiales didácticos.

Actualmente la computadora es un elemento que se encuentra en el entorno de nuestros estudiantes, a la que puede tener acceso con relativa facilidad, y que podemos ayudar a integrarla en su vida como una herramienta que le puede ser significativamente útil. ¿Por qué no hacerlo desde la escuela?

En las asignaturas asociadas con disciplinas científicas como la Física o la Química, el uso de la computadora puede funcionar como un factor motivante y ser una valiosa herramienta que, además de permitir registrar, sistematizar, analizar e interpretar información que los estudiantes obtienen de sus investigaciones experimentales (como se ha mostrado con alumnos del CCH), les proporciona la posibilidad de hacerse de información al consultar bancos de información computarizada.

Una opción diferente es la utilización de Multimedia y de CD-ROM para usar discos compactos que contienen una amplia información como la registrada en las conocidas como Enciclopedias Multimedia en las que aparecen textos, artículos, sonido, ilustraciones, videos animaciones y imágenes fotográficas; programas para grabar la voz, vocalización del lenguaje en el aprendizaje de un idioma extranjero; programas que son un Atlas en donde se puede tener acceso a mapas, datos y estadísticas de habitantes, economía, tipo de gobierno de una gran número de países; programas para aprender a leer entre otras muchas opciones. Estas alternativas podrán responder a las necesidades o los intereses personales de estudiantes.

Otra posibilidad que se caracteriza por dar una atención más personalizada a los estudiantes es el uso de programas de cómputo educativos, en donde es importante que el PCE y su tipo de modelo sean congruentes con el contenido temático del programa de la asignatura y el enfoque del curso; de otra manera, este camino llevará al fracaso.

En particular, el programa *PROPSATM.BAS* que desarrollé para este Trabajo de Tesis tiene las siguientes características:

1º A través del uso del PCE el alumno o el profesor pueden tener acceso a información sobre algunas de las propiedades atómicas de los elementos (radios y energías por nivel, energía total, primer potencial de ionización) de una manera global y por intervalos de acuerdo a los números atómicos que ellos mismos fijaran.

2º Muestra gráficamente las relaciones entre los valores de los números atómicos del total de elementos (o de un rangos específico de ellos) con sus radios atómicos, energías totales y primeros potenciales de ionización.

3º Permite al alumno o al profesor elegir libremente una colección de 4 elementos y contrastar simultáneamente sus propiedades atómicas mostrando gráficamente la diferencia o similitud entre sus tamaños, de tal manera que este ejercicio puede repetirse el número de veces que deseen seleccionando las combinaciones que consideren más convenientes.

4º Puede servir de apoyo a cursos actuales de Física o Química, ya sea en el bachillerato o en los primeros semestres de algunas licenciaturas.

De acuerdo a las características de este programa considero que puede ser clasificado fundamentalmente como un programa de CONSULTA dado que el usuario puede tener acceso a información y desplegar los datos almacenados en el programa, los cuales se encuentran bajo la forma de textos, gráficas, listados de datos (consulta directa) al decidir sobre las diferentes opciones presentadas en el menú de CONTENIDO.

De manera paralela, el programa puede ser utilizado para generar preguntas que puedan ser respondidas a través de su consulta, y en este sentido puede tener un uso alternativo y clasificarse entonces como de CUESTIONAMIENTO.

Respecto a su aplicación, este programa puede utilizarse como un apoyo didáctico para los estudiantes en sus cursos de Química I y II del Bachillerato del Colegio de Ciencias y Humanidades, en los cursos de Química II y Química III de la Escuela Nacional Preparatoria, en los cursos de Química del Colegio de Bachilleres, en el curso de Estructura de la Materia de la Facultad de Química y en el curso de Física Moderna I de Licenciatura de Física en la Facultad de Ciencias.

El programa de cómputo puede extenderse, en el futuro, para incluir reacciones químicas simples como la formación de haluros alcalinos.

En relación a la determinación de energías por nivel o totales para cada uno de los 109 elementos, en donde se consideran átomos complejos a aquéllos que poseen más de un electrón por la dificultad para conocer el potencial debido a la interacción entre los electrones y, dado que la función de onda resulta ser no-separable, es importante desarrollar métodos que sean capaces de proporcionar soluciones aproximadas y que efectivamente coincidan con los resultados obtenidos experimentalmente.

Entre los métodos que han sido utilizados pueden mencionarse el de Thomas-Fermi, el propuesto por Hartree y Fock, y los que podría

llamar simplificados, como los propuestos por Sucher, Kregar y Weisskopf, y R. W. Gómez.

Para el método de Thomas y Fermi se tiene la limitante de que la condición de una variación lenta en el potencial radial no proporciona buenos resultados para el caso de átomos con pocos electrones debido a que en estos casos tal aproximación es falsa; sin embargo, a medida que el número atómico Z aumenta, este modelo coincide cada vez más con los resultados reales.

La aproximación de Hartree y Fock (1957) es un método para obtener funciones de onda totales para un sistema de muchos electrones. Este método ha sido aplicado con buenos resultados en muchas áreas de la Mecánica Cuántica, incluyendo sistemas atómicos y moleculares, así como en Estado Sólido. El método está basado en una aproximación de campo central y en el Principio Variacional en donde si se consideran las configuraciones electrónicas de los elementos. Este método proporciona mejores resultados que los obtenidos con el método de Thomas-Fermi, y puede afirmarse éste es el más preciso, sin embargo puede mencionarse como una desventaja el hecho de que es el método más complicado y que requiere necesariamente del diseño de programas de cómputo para tener la posibilidad real de procesar la información y calcular los valores.

El modelo propuesto por Sucher se considere como uno de los métodos más simplificados mediante el cual es posible determinar la energía de cualquier átomo en su estado base a partir de su número atómico Z . Sucher considera la densidad de probabilidad asociada a un electrón en una determinada capa en términos de la función delta, ignora la interacción de intercambio entre electrones en las capas con diferentes valores de n y que la interacción de intercambio entre electrones en capas con el mismo valor de n se aproximan por la correspondiente interacción directa, todo ello para poder calcular la distancia de interacción entre el electrón y el núcleo y entre electrones. Sucher reporta que estos valores prácticamente coinciden con los calculados por Hartree y Fock, difiriendo en un pequeño porcentaje para todos los valores de Z que resulta ser máximo (6%) para el neón.

El Método propuesto por Weisskopf y Kregar se basa en reescribir la distancia entre un par de electrones en términos del radio promedio medido desde el centro; para ello presupone la existencia de un parámetro β que será menor que la unidad. La dificultad radica en conocer el valor de β el cual está determinado por la función de densidad electrónica que dependerá del elemento de que se trate (se considera que $\beta=5/8=0.625$, excepto para valores de Z pequeños ($\beta=0.8$)).

El modelo de R. Gómez surge por dar una mejor solución ante la dificultad de cálculo que introduce el potencial de interacción entre los electrones. R. W. Gómez G. desarrolló un modelo sencillo que permite determinar éstas a partir de un argumento geométrico al seguir la propuesta de Kregar y Weisskopf respecto a una parámetro

libre β , con la diferencia de que su cálculo resulta significativamente más sencillo que cualquiera de los demás y con valores numéricos calculados que resultan muy próximos a los determinados por Hartree y Fock.

Como puede apreciarse en la penúltima gráfica del capítulo anterior en la que se relaciona de manera simultánea el número atómico de los elementos con la energía total asociada a cada átomo de éstos, podemos apreciar que los resultados obtenidos por tres de los métodos (Hartree-Fock, Sucher y Gómez) prácticamente son iguales para Z dentro del intervalo [1,40].

A medida que el valor del número atómico aumenta también se va incrementando la diferencia entre los valores de la energía total que predicen los diferentes métodos. Sin embargo puede apreciarse que los reportados por Gómez y por Sucher coinciden para Z dentro del intervalo [1, 83], por lo que podemos decir que aunque ambos predicen prácticamente los mismos valores para las energías totales de los elementos, el método propuesto por R. Gómez tiene la ventaja de ser mucho más sencillo de seguir sobre el de Sucher.

Para encontrar valores obtenidos experimentalmente, dado que cada uno de los autores de los modelos solo llegan a mencionar valores experimentales de energías totales de dos o tres elementos, decidí trabajar con los valores experimentales de los primeros 20 potenciales de ionización y de esta manera calcular la energía total de los elementos con $Z \in [1,20]$. Al contrastar los resultados obtenidos con los métodos desarrollados en el capítulo anterior con los obtenidos experimentalmente, como puede apreciarse en la última gráfica, nuevamente encontré que había coincidencia entre ellos.

Los valores encontrados por Weisskopf son los que difieren más de los valores experimentales, diferencia que crece a medida que Z aumenta, por lo que puedo afirmar que este método es el menos preciso para determinar los valores de estas energías.

En el caso del método propuesto por Sucher, sus valores resultan ligeramente menores a los experimentales.

Para los modelos de Hartree-Fock y de Gómez encontré el efecto contrario, los valores de la energía total resultan ligeramente superiores a los experimentales aunque el que más se acerca es el de Hartree-Fock.

Esta conclusión coincide con lo afirmado en diferentes fuentes bibliográficas acerca de que los valores predichos por Hartree y Fock tienen mayor confiabilidad que los otros dado que se aproximan más a los valores reales.

En función de cual sea la precisión que se necesite para determinar los valores de estas energías, será la decisión que habrá de tomarse para seleccionar el Método más adecuado.

BIBLIOGRAFIA

- Alonso, Marcelo y Finn, Edward J.. Fundamental University Physics. Quantum and Statistical Physics. EUA, Addison-Wesley, 1986. [Volume III]
- Asbhy, Neil y Muller, Stanley C.. Principles of Modern Physics. EUA, Holden-Day, 1970.
- Beiser, Arthur. Conceptos de Física Moderna. EUA, Mc Graw Hill, 1965
- Blinder, S. M.. "Basic Concepts of Self-Consistent-Field Theory" en American Journal of Physics, vol. 33, No. 6, pp. 431-443, 1965.
- Bunge F. Carlos, Barrientos José A. y Bunge, Annik Vivier. "Roothaan-Hartree-Fock Ground-State Atomic Wave Functions: Slater-type Orbital Expansions and Expectation values para $Z=2-54$ " en Atomic Data and Nuclear Data Tables, vol. 53, No.1, pp. 113-162, 1993.
- Carlson, C. et al. "Relativistic Hartree-Fock-Slater Eigenvalues, radial expectation values, and potentials for atoms, $2 < Z < 126$ " en Atomic Data, vol. 3, No. 1, pp. 1-131, 1971.
- Casillas Pellat, José Jesús. Un modelo para calcular energías atómicas Tesis en la Facultad de Ciencias, México, UNAM, 1986.
- Froese Fischer Charlotte, The Hartree-Fock Method for Atoms. A Numerical Approach. EUA, John Wiley & Sons, 1977.
- Gómez González, Raúl W.. "Ground and excited energy levels of helium-like atoms using a simple geometrical model" en European J. Physics, vol. 13, pp. 135-138, UK, 1991.
- Gray, Harry B. y Haight, Gilbert P. Jr.. Principios Básicos de Química, España, Reverté, 1969.
- Handbook of Chemistry and Physics. A Ready-Reference Book De Chemical and Physical Data. USA, CRC Press, 1976-1977. [57th Edition]
- Lide, David R.. Handbook of Chemistry and Physics. USA, CRC Press, 1991-1992. [72nd Edition]
- Hein, Morris. Química. México, Grupo Editorial Iberoamérica, 1992.
- Kregar Mitja y Weisskopf, Víctor F.. "Ionization energies and electron affinities of atoms up to neon" en American Journal of Physics, vol. 50, No. 3, pp. 213-218, March 1982.

- Mahan, Bruce H. Química. Curso Universitario. EUA, Fondo Educativo Interamericano, 1977.
- Slater, John C.. Quantum Theory of Atomic Structure. EUA, Mc Graw-Hill, 1960.
- Sucher, Joseph. "Ground-state energy of any atom" en Journal of Physics (B: At. Mol. Phys). No. 11, pp. 1515-1520, USA, 1977.
- Summers, Donald B. Manual de Química. Tablas, constantes, fórmulas e información general. México, Grupo Editorial Iberoamérica, 1993.
- Trejo, Mario. La estructura del átomo. Publicaciones Cultural, México, 1986.
- Weisskopf, Victor F.. "Search for Simplicity: Atoms with several electrons" en American Journal of Physics, vol. 53, No. 4, pp. 304-305, EUA, abril de 1985.

ANEXO A
Listado del Programa
PROPSATM.BAS

```
5 REM "nombre del archivo:PROPSATM.BAS"
10 CLS
20 KEY OFF: SCREEN 1: COLOR 4, 1
30 LOCATE 8, 10: PRINT "P R O P I E D A D E S"
40 LOCATE 11, 13: PRINT "A T O M I C A S"
170 LOCATE 17, 15
180 PRINT "Elaborado por:"
190 LOCATE 19, 10
200 PRINT "VIRGINIA ASTUDILLO REYES"
210 LOCATE 23, 5
220 PRINT "Para continuar presiona ENTER"
221 LINE (5, 5)-(300, 5)
222 LINE -(300, 190)
223 LINE -(5, 190)
224 LINE -(5, 5)
225 LINE (5, 20)-(300, 20)
230 IF INKEY$ = "" THEN 230
240 SCREEN 1: COLOR 1, 5: SCREEN 2
241 LINE (5, 5)-(600, 5)
242 LINE -(600, 190)
243 LINE -(5, 190)
244 LINE -(5, 5)
245 LINE (5, 20)-(600, 20)
250 LOCATE 2, 20: PRINT "C O N T E N I D O"
251 LINE (225, 47)-(228, 45): LINE (226, 47)-(229, 45): LINE (314,
47)-(318, 45): LINE (315, 47)-(319, 45)
252 LINE (154, 64)-(158, 62): LINE (265, 64)-(269, 62): LINE (153,
64)-(157, 62): LINE (264, 64)-(268, 62)
253 LINE (300, 80)-(304, 78): LINE (155, 80)-(159, 78): LINE (301,
80)-(305, 78): LINE (156, 80)-(160, 78)
254 LINE (155, 95)-(159, 93): LINE (452, 95)-(456, 93): LINE (156,
95)-(160, 93): LINE (453, 95)-(456, 93)
255 LINE (214, 111)-(218, 109): LINE (370, 111)-(374, 109): LINE
(213, 111)-(217, 109): LINE (371, 111)-(375, 109)
```

```

256 LINE (185, 154)-(185, 155): LINE (185, 155)-(183, 156): LINE
(183, 156)-(183, 158): LINE (183, 158)-(187, 158): LINE (187, 158)-
(187, 156): LINE (185, 150)-(185, 151)
257 LINE (186, 154)-(186, 155): LINE (186, 155)-(184, 156): LINE
(184, 156)-(184, 158): LINE (184, 158)-(188, 158): LINE (188, 158)-
(188, 156): LINE (186, 150)-(186, 151)
258 LINE (204, 126)-(208, 124): LINE (203, 128)-(207, 124)
260 LOCATE 5, 15: PRINT "1. Modelo de R. Gómez para calcular
energías atómicas": LOCATE 7, 15: PRINT "2. Determinación de
Energías por nivel y total": LOCATE 17, 15: PRINT "7. Características
de los elementos"
261 LOCATE 9, 15: PRINT "3. Gráfica de Energías Totales"
262 LOCATE 11, 15: PRINT "4. Gráfica de Radio Atómico"
264 LOCATE 13, 15: PRINT "5. Gráfica de Primer Potencial de
ionización": LOCATE 15, 15: PRINT "6. Comparación de propiedades
atómicas entre elementos"
265 LOCATE 19, 15: PRINT "8. SALIR"
266 LOCATE 23, 45: PRINT "Presiona ENTER para continuar"
270 LOCATE 20,25:INPUT "CUAL ES LA OPCION QUE DESEAS", V
280 IF V = 1 THEN GOTO 55000
290 IF V = 2 THEN GOTO 650
300 IF V = 3 THEN GOTO 9000
301 IF V = 4 THEN GOTO 7000
302 IF V = 5 THEN GOTO 12000
304 IF V = 6 THEN GOTO 3000
306 IF V = 7 THEN GOTO 15000
308 IF V = 8 THEN GOTO 2440
310 IF V<>1 OR V<>2 OR V<>3 OR V<>4 OR V<>5 OR V<>6 OR
V<>7 OR V<>8 THEN GOTO 312
312 CLS: LOCATE 10, 8:PRINT "Solamente puedes elegir": LOCATE
12, 3: PRINT "de las opciones que se presentan":LOCATE 23,
6:PRINT"Presiona ENTER para continuar"
315 IF INKEY$ = "" THEN 315
320 IF INKEY$ = "" THEN 240
650 CLS : SCREEN 2: SCREEN 0: COLOR 5, 0
660 INPUT ""Cu l es el número atómico del elemento "; Z
670 A = INT(Z): M = Z - A: IF M <> 0 THEN LOCATE 6, 12: PRINT
"Cometiste un error, no existe elemento con tal valor de Z": LOCATE

```

```

9, 16: PRINT "Recuerda que Z debe ser un número entero dentro":
LOCATE 10, 25: PRINT "del intervalo [1,109]": GOTO 2425
680 IF Z < 1 OR Z > 109 THEN LOCATE 6, 12: PRINT "Cometiste un
error, no existe elemento con tal valor de Z": LOCATE 9, 16: PRINT
"Recuerda que Z debe ser un número entero dentro": LOCATE 10,
25: PRINT "del intervalo [1,109]": GOTO 2425
690 GOSUB 1210
695 PRINT
700 PRINT "    El elemento es "; E$; " (Z="; Z; ")"
705 PRINT
710 PRINT "    ", "NIVEL"; TAB(35); "ENERGIA POR NIVEL"
720 PRINT "    ", TAB(35); " (Hartree)"
730 T = 0
740 B = 2 / (2 + (2 ^ .5))
750 IF Z<3 THEN NX=1: NEX=Z: ZX=Z: GOTO 2340
760 NX=1: NEX=2: ZX=Z: GOSUB 2260
770 IF Z<11 THEN NX = 2: NEX=Z- 2: ZX=Z - 2: GOTO 2340
780 NX=2: NEX=8: ZX=Z - 2: GOSUB 2260
790 IF Z<19 THEN NX=3: NEX=Z - 10: ZX=Z - 10: GOTO 2340
800 IF Z=19 OR Z=24 THEN NX=3: NEX=Z-11: ZX=Z-10: GOSUB 2260
810 IF Z=19 OR Z=24 THEN NX=4: NEX=1: ZX=1: GOTO 2340
820 IF Z<29 THEN NX=3: NEX=Z-12: ZX=Z-10: GOSUB 2260
830 IF Z<29 THEN NX=4: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
840 NX=3: NEX=18: ZX=Z-10: GOSUB 2260
850 IF Z<37 THEN NX=4: NEX=Z-28: ZX=Z-28: GOTO 2340
860 IF Z=37 THEN NX=4: NEX=8: ZX=9: GOSUB 2260
862 IF Z=37 THEN NX=5: NEX=1: ZX=1: GOTO 2340
865 IF Z<41 THEN NX=4: NEX=Z-30: ZX=Z-28: GOSUB 2260
867 IF Z<41 THEN NX=5: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
870 IF Z=43 THEN NX=4: NEX=13: ZX=15: GOSUB 2260
872 IF Z=43 THEN NX=5: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
900 IF Z<46 THEN NX=4: NEX=Z-29: ZX=Z-28: GOSUB 2260
910 IF Z<46 THEN NX=5: NEX=1: ZX=1: GOTO 2340
920 IF Z=46 THEN NX=4: NEX=18: ZX=Z-28: GOTO 2340
930 IF Z<55 THEN NX=4: NEX=18: ZX=Z-28: GOSUB 2260
940 IF Z<55 THEN NX=5: NEX=Z-46: ZX=Z-46: GOTO 2340
945 IF Z=55 THEN NX=4: NEX=18: ZX=Z-28: GOSUB 2260
950 IF Z=55 THEN NX=5: NEX=8: ZX=9: GOSUB 2260
952 IF Z=55 THEN NX=6: NEX=1: ZX=1: GOTO 2340

```

955 IF Z=57 OR Z=64 THEN NX=4:NEX=Z-39:ZX=Z-28:GOSUB 2260
960 IF Z=57 OR Z=64 THEN NX=5: NEX=9: ZX=11: GOSUB 2260
970 IF Z=57 OR Z=64 THEN NX=6: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
972 IF Z=58 THEN NX=4: NEX=19: ZX=Z-28: GOSUB 2260
974 IF Z=58 THEN NX=5: NEX=9: ZX=11: GOSUB 2260
976 IF Z=58 THEN NX=6: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
980 IF Z<71 THEN NX=4: NEX=Z-38: ZX=Z-28: GOSUB 2260
990 IF Z<71 THEN NX=5: NEX=8: ZX=10: GOSUB 2260
1000 IF Z<71 THEN NX=6: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
1010 N=4: NEX=32: ZX=Z-28: GOSUB 2260
1020 IF Z<77 THEN NX=5: NEX=Z-62: ZX=Z-60: GOSUB 2260
1030 IF Z<77 THEN NX=6: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
1040 IF Z=77 THEN NX=5: NEX=15: ZX=17: GOSUB 2260
1045 IF Z=77 THEN NX=6: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
1050 IF Z=78 THEN NX=5: NEX=17: ZX=18: GOSUB 2260
1060 IF Z=78 THEN NX=6: NEX=1: ZX=1: GOTO 2340
1070 IF Z<87 THEN NX=5: NEX=18: ZX=Z-60: GOSUB 2260
1080 IF Z<87 THEN NX=6: NEX=Z-78: ZX=Z-78: GOTO 2340
1090 IF Z=87 THEN NX=5: NEX=18: ZX=27: GOSUB 2260
1100 IF Z=87 THEN NX=6: NEX=8: ZX=9: GOSUB 2260
1110 IF Z=87 THEN NX=7: NEX=1: ZX=1: GOTO 2340
1120 IF Z<91 THEN NX=5: NEX=18: ZX=Z- 60: GOSUB 2260
1130 IF Z<91 THEN NX= 6: NEX=Z-80: ZX=Z-78: GOSUB 2260
1140 IF Z<91 THEN NX=7: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
1142 IF Z<94 THEN NX=5: NEX=Z-71: ZX=Z-60: GOSUB 2260
1144 IF Z<94 THEN NX=6: NEX=9: ZX=11: GOSUB 2260
1146 IF Z<94 THEN NX=7: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
1150 IF Z<96 THEN NX=5: NEX=Z-70: ZX=Z-60: GOSUB 2260
1152 IF Z<96 THEN NX=6: NEX=8: ZX=10: GOSUB 2260
1154 IF Z<96 THEN NX=7: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
1156 IF Z<101 THEN NX=5: NEX=Z-70: ZX=Z-60: GOSUB 2260
1158 IF Z<101 THEN NX=6: NEX=8: ZX=10: GOSUB 2260
1160 IF Z<101 THEN NX=7: NEX=2: ZX= 2: GOTO 2340
1165 IF Z<104 THEN NX=5: NEX=Z-71: ZX=Z- 60: GOSUB 2260
1167 IF Z<104 THEN NX=6: NEX=9: ZX=11: GOSUB 2260
1170 IF Z<104 THEN NX=7: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340
1180 NX=5: NEX=32: ZX=Z-60: GOSUB 2260
1190 NX=6: NEX=Z-94: ZX=Z-92: GOSUB 2260
1200 NX=7: NEX=2: ZX=2: GOTO 2340

```

1210 IF Z=1 THEN E$="HIDROGENO":C$="1s(1)":D$="H":
EB$="2S": RETURN
1220 IF Z=2 THEN E$="HELIO":C$="1s(2)":D$="He":EB$="1S":
RETURN
1230 IF Z=3 THEN E$="LITIO":C$="1s(2)2s(1)=[He]2s(1)":D$="Li":
EB$="2S": RETURN
1240 IF Z=4 THEN E$="BERILIO":C$="1s(2)2s(2)=[He]2s(2)":
D$="Be":EB$="1S": RETURN
1250 IF Z=5 THEN E$="BORO": C$="                1s(2)2s(2)
2p(1)=[He]2s(2)2p(1)": D$="B": EB$="2P1/2": RETURN
1260 IF Z = 6 THEN E$ = "CARBONO": C$ = "                1s(2)
2s(2) 2p(2)=[He] 2s(2) 2p(2)": D$ = "C": EB$ = "3P0": RETURN
1270 IF Z = 7 THEN E$ = "NITROGENO": C$ = "                1s(2)
2s(2) 2p(3)=[He] 2s(2) 2p(3)": D$ = "N": EB$ = "4S": RETURN
1280 IF Z=8 THEN E$="OXIGENO":C$="                1s(2)
2s(2)2p(4)=[He]2s(2)2p(4)":D$="O":EB$="3P2":RETURN
1290 IF Z=9 THEN E$="FLUOR":C$="                1s(2)2s(2)
2p(5)=[He] 2s(2) 2p(5)": D$ = "F": EB$ = "2P3/2": RETURN
1300 IF Z = 10 THEN E$ = "NEON": C$ = "                1s(2) 2s(2)
2p(6)": D$ = "Ne": EB$ = "1S": RETURN
1310 IF Z = 11 THEN E$ = "SODIO": C$ = "                1s(2)
2s(2) 2p(6) 3s(1)=[Ne] 3s(1)": D$ = "Na": EB$ = "2S": RETURN
1320 IF Z = 12 THEN E$ = "MAGNESIO": C$ = "                1s(2)
2s(2) 2p(6) 3s(2)=[Ne] 3s(2)": D$ = "Mg": EB$ = "1S": RETURN
1330 IF Z=13 THEN E$="ALUMINIO":C$="                1s(2)
2s(2)2p(6)3s(2)3p(1)=[Ne]3s(2)3p(1)":D$="Al":EB$="2P1/2":RETURN
1340 IF Z=14 THEN E$="SILICIO":C$="                1s(2) 2s(2)
2p(6) 3s(2) 3p(2)=[Ne] 3s(2) 3p(2)": D$="Si":EB$="3P0": RETURN
1350 IF Z=15 THEN E$ = "FOSFORO":C$=" 1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)3p
(3)=[Ne]3s(2)3p(3)":D$="P":EB$="4S": RETURN
1360 IF Z=16 THEN E$ = "AZUFRE": C$ = "                1s(2) 2s(2)
2p(6) 3s(2) 3p(4)=[Ne] 3s(2) 3p(4)": D$ = "S": EB$ = "3P2": RETURN
1370 IF Z=17 THEN E$="CLORO": C$ = "                1s(2) 2s(2)
2p(6) 3s(2) 3p(5)=[Ne] 3s(2) 3p(5)": D$="Cl":EB$ = "2P3/2": RETURN
1380 IF Z=18 THEN E$="ARGON": C$ = "                1s(2)
2s(2) 2p(6) 3s(2) 3p(6)": D$ = "Ar": EB$ = "1S": RETURN
1390 IF Z=19 THEN E$="POTASIO":C$="                1s(2) 2s(2)
2p(6) 3s(2) 3p(6) 4s(1)=[Ar] 4s(1)": D$ = "K": EB$ = "2S": RETURN

```

```

1400 IF Z=20 THEN E$="CALCIO":C$="          1s(2) 2s(2)
2p(6) 3s(2) 3p(6) 4s(2)=[Ar] 4s(2)": D$="Ca":EB$="1S": RETURN
1410 IF Z=21 THEN E$="ESCANDIO":C$="    1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(1) 4s(2)=[Ar] 3d(1) 4s(2)":D$="Sc": EB$="2D3/2": RETURN
1420 IF Z=22 THEN E$="TITANIO":C$="      1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(2) 4s(2)=[Ar] 3d(2) 4s(2)":D$="Ti":EB$="3F2": RETURN
1430 IF Z=23 THEN E$="VANADIO":C$="      1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(3) 4s(2)=[Ar] 3d(3) 4s(2)":D$="V":EB$="4F3/2": RETURN
1440 IF Z=24 THEN E$="CROMO":C$="        1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(5) 4s(1)=[Ar] 3d(5) 4s(1)": D$="Cr":EB$="7S": RETURN
1450 IF Z=25 THEN E$="MANGANESO": C$="    1s(2) 2s(2) 2p(6)
3s(2) 3p(6) 3d(5) 4s(2)=[Ar]3d(5) 4s(2)":D$="Mn":EB$="6S": RETURN
1460 IF Z=26 THEN E$="FIERRO":C$="       1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(6) 4s(2)=[Ar] 3d(6) 4s(2)":D$="Fe": EB$="5D4": RETURN
1470 IF Z=27 THEN E$="COBALTO":C$="      1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(7) 4s(2)=[Ar] 3d(7) 4s(2)":D$="Co": EB$="4F9/2": RETURN
1480 IF Z=28 THEN E$="NIQUEL":C$="       1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(8) 4s(2)=[Ar] 3d(8) 4s(2)":D$="Ni":EB$="2S": RETURN
1490 IF Z=29 THEN E$="COBRE":C$="        1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(10) 4s(1)=[Ar] 3d(10) 4s(1)":D$="Cu":EB$="2S": RETURN
1500 IF Z=30 THEN E$="ZINC":C$="         1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2) 3p(6)
3d(10) 4s(2)=[Ar] 3d(10) 4s(2)":D$="Zn":EB$="1S": RETURN
1510 IF Z = 31 THEN E$ = "GALIO": C$ = "          1s(2) 2s(2) 2p(6)
3s(2) 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(1)=[Ar] 3d(10) 4s(2) 4p(1)": D$ = "Ga":
EB$ = "2P1/2": RETURN
1520 IF Z=32 THEN E$="GERMANIO":C$="      1s(2) 2s(2) 2p(6)
3s(2) 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(2) = [Ar] 3d(10) 4s(2) 4p(2)":
D$="Ge":EB$="3P0":RETURN
1530 IF Z=33 THEN E$="ARSENICO":C$="      1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(3) = [Ar] 3d(10) 4s(2) 4p(3)": D$ = "As": EB$ =
"4S": RETURN
1540 IF Z=34 THEN E$="SELENIO":C$="       1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
3p(6)3d(10)4s(2)4p(4)=[Ar]3d(10)4s(2)4p(4)":D$="Se": EB$ = "3P2":
RETURN
1550 IF Z = 35 THEN E$ = "BROMO": C$ = "          1s(2) 2s(2) 2p(6)
3s(2) 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(5)=[Ar] 3d(10) 4s(2) 4p(5)": D$ = "Br": EB$
= "2P3/2": RETURN
1560 IF Z = 36 THEN E$ = "KTIPTON": C$ = "          1s(2) 2s(2)
2p(6) 3s(2) 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6)": D$ = "Kr": EB$ = "1S": RETURN

```


1700 IF Z = 50 THEN E\$ = "ESTAÑO": C\$ = " 1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 5s(2) 5p(2) = [Kr]
 4d(10) 5s(2) 5p(2)": D\$ = "Sn": EB\$ = "3P0": RETURN
 1710 IF Z = 51 THEN E\$ = "ANTIMONIO": C\$ = " 1s(2) 2s(2) 2p(6)
 3s(2) 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 5s(2) 5p(3) = [Kr]
 4d(10) 5s(2) 5p(3)": D\$ = "Sb": EB\$ = "4S": RETURN
 1720 IF Z = 52 THEN E\$ = "TELURO": C\$ = " 1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 5s(2) 5p(4) = [Kr]
 4d(10) 5s(2) 5p(4)": D\$ = "Te": EB\$ = "3P2": RETURN
 1730 IF Z=53 THEN E\$="IODO":C\$=" 1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)3p(6)
 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 5s(2) 5p(5) [Kr] 4d(10) 5s(2) 5p(5)":
 D\$ = "I": EB\$ = "2P3/2": RETURN
 1740 IF Z=54 THEN E\$="XENON": C\$ = " 1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)3p(6)
 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10)5s(2)5p(6)":D\$="Xe":EB\$="1S": RETURN
 1750 IF Z = 55 THEN E\$ = "CESIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 5s(2) 5p(6) 6s(1) = [Xe] 6s(1)":
 D\$ = "Cs": EB\$ = "2S": RETURN
 1760 IF Z = 56 THEN E\$ = "BARIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 5s(2) 5p(6) 6s(2) = [Xe] 6s(2)":
 D\$ = "Ba": EB\$ = "1S": RETURN
 1770 IF Z = 57 THEN E\$ = "LANTANO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 5s(2) 5p(6) 5d(1) 6s(2) = [Xe]
 5d(1) 6s(2)": D\$ = "La": EB\$ = "2D3/2": RETURN
 1780 IF Z = 58 THEN E\$ = "CERIO": C\$ = " 1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(1) 5s(2) 5p(6) 5d(1)
 6s(2) = [Xe] 4f(1) 5d(1) 6s(2)": D\$ = "Ce": EB\$ = "1G4": RETURN
 1790 IF Z=59 THEN E\$="PRASEODIMIO":C\$=" 1s(2)2s(2)2p(6)
 3s(2)3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(3)5s(2) 5p(6)6s(2)=[Xe] 4f(3)
 6s(2)": D\$ = "Pr": EB\$ = "4I9/2": RETURN
 1800 IF Z = 60 THEN E\$ = "NEODIMIO": C\$ = " 1s(2) 2s(2) 2p(6)
 3s(2) 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(4) 5s(2) 5p(6)
 6s(2) = [Xe] 4f(4) 6s(2)": D\$ = "Nd": EB\$ = "5I4": RETURN
 1810 IF Z = 61 THEN E\$ = "PROMETIO": C\$ = " 1s(2) 2s(2) 2p(6)
 3s(2) 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(5) 5s(2) 5p(6)
 6s(2) = [Xe] 4f(5) 6s(2)": D\$ = "Pm": EB\$ = "6H5/2": RETURN
 1820 IF Z = 62 THEN E\$ = "SAMARIO": C\$ = " 1s(2) 2s(2) 2p(6)
 3s(2) 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(6) 5s(2) 5p(6)
 6s(2) = [Xe] 4f(6) 6s(2)": D\$ = "Sm": EB\$ = "7F0": RETURN

1830 IF Z = 63 THEN E\$ = "EUROPIO": C\$ = " 1s(2) 2s(2) 2p(6)
 3s(2) 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(7) 5s(2) 5p(6)
 6s(2) = [Xe] 4f(7) 6s(2)": D\$ = "Eu": EB\$ = "8S": RETURN
 1840 IF Z=64 THEN E\$="GADOLINIO":C\$=" 1s(2)2s(2)2p(6)
 3s(2)3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(7)5s(2) 5p(6) 5d(1) 6s(2) =
 [Xe] 4f(7) 5d(1) 6s(2)": D\$ = "Gd": EB\$ = "9D2": RETURN
 1850 IF Z = 65 THEN E\$ = "TERBIO": C\$ = " 1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(9) 5s(2) 5p(6) 6s(2) =
 [Xe] 4f(9) 6s(2)": D\$ = "Tb": EB\$ = "6H15/2": RETURN
 1860 IF Z = 66 THEN E\$ = "DISPROSIO": C\$ = " 1s(2) 2s(2) 2p(6)
 3s(2) 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(10) 5s(2) 5p(6)
 6s(2) = [Xe] 4f(10) 6s(2)": D\$ = "Dy": EB\$ = "5I8": RETURN
 1870 IF Z = 67 THEN E\$ = "HOLMIO": C\$ = " 1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(11) 5s(2) 5p(6) 6s(2) =
 [Xe] 4f(11) 6s(2)": D\$ = "Ho": EB\$ = "4I15/2": RETURN
 1880 IF Z = 68 THEN E\$ = "ERBIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(12) 5s(2) 5p(6) 6s(2)
 = [Xe] 4f(12) 6s(2)": D\$ = "Er": EB\$ = "3H6": RETURN
 1890 IF Z = 69 THEN E\$ = "TULIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(13) 5s(2) 5p(6) 6s(2)
 = [Xe] 4f(13) 6s(2)": D\$ = "Tm": EB\$ = "2F7/2": RETURN
 1900 IF Z = 70 THEN E\$ = "ITERBIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 6s(2)
 = [Xe] 4f(14) 6s(2)": D\$ = "Yb": EB\$ = "1S": RETURN
 1910 IF Z = 71 THEN E\$ = "LUTECIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(1)
 6s(2) = [Xe] 4f(14) 5d(1) 6s(2)": D\$ = "Lu": EB\$ = "2D3/2": RETURN
 1920 IF Z = 72 THEN E\$ = "HAFNIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(2)
 6s(2) = [Xe] 4f(14) 5d(2) 6s(2)": D\$ = "Hf": EB\$ = "3F2": RETURN
 1930 IF Z = 73 THEN E\$ = "TANTALIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(3)
 6s(2) = [Xe] 4f(14) 5d(3) 6s(2)": D\$ = "Ta": EB\$ = "4F3/2": RETURN
 1940 IF Z=74 THEN E\$="WOLFRANIO":C\$="1s(2)2s(2)2p(6)
 3s(2)3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(4)
 6s(2) = [Xe] 4f(14) 5d(4) 6s(2)": D\$ = "W": EB\$ = "5D0": RETURN
 1950 IF Z = 75 THEN E\$ = "RENIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(5)
 6s(2) = [Xe] 4f(14) 5d(5) 6s(2)": D\$ = "Re": EB\$ = "6S": RETURN

```

1960 IF Z = 76 THEN E$ = "OSMIO": C$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(6)
6s(2) = [Xe] 4f(14) 5d(6) 6s(2)": D$ = "Os": EB$ = "5D4": RETURN
1970 IF Z = 77 THEN E$ = "IRIDIO": C$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(7)
6s(2) = [Xe] 4f(14) 5d(7) 6s(2)": D$ = "Ir": EB$ = "4F9/2": RETURN
1980 IF Z = 78 THEN E$ = "PLATINO": C$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(9)
6s(1) = [Xe] 4f(14) 5d(9) 6s(1)": D$ = "Pt": EB$ = "3D3": RETURN
1990 IF Z = 79 THEN E$ = "ORO": C$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2) 3p(6)
3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10)
6s(1) = [Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(1)": D$ = "Au": EB$ = "2S": RETURN
2000 IF Z=80 THEN E$="MERCURIO":C$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2) 5p(6) 5d(10) 6s(2) =
[Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(2)": D$ = "Hg": EB$ = "1S": RETURN
2010 IF Z = 81 THEN E$ = "TALIO": C$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(10) 4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2) 5p(6)5d(10)6s(2)6p(1)
= [Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(2) 6p(1)":D$="Tl":EB$="2P1/2": RETURN
2020 IF Z = 82 THEN E$ = "PLOMO": C$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10) 6s(2)
6p(2)=[Xe]4f(14)5d(10)6s(2)6p(2)":D$ = "Pb": EB$ = "3P0": RETURN
2030 IF Z = 83 THEN E$ = "BISMUTO": C$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10) 6s(2)
6p(3) = [Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(2) 6p(3)":D$="Bi":EB$="4S": RETURN
2040 IF Z = 84 THEN E$ = "POLONIO": C$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2) 5p(6) 5d(10) 6s(2) 6p(4)
=[Xe]4f(14)5d(10)6s(2)6p(4)":D$="Po":EB$="3P2": RETURN
2050 IF Z=85 THEN E$="ASTATINIO":C$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
3p(6) 3d(10) 4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2) 5p(6) 5d(10) 6s(2) 6p(5)
= [Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(2) 6p(5)": D$ = "At": EB$="2P3/2": RETURN
2060 IF Z=86 THEN E$="RADON": C$="1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2) 3p(6)
3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10)
6s(2) 6p(6)": D$ = "Rn": EB$ = "1S": RETURN
2070 IF Z = 87 THEN E$ = "FRANCIO": C$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6)
5d(10) 6s(2)6p(6) 7s(1) = [Rn] 7s(1)": D$ = "Fr": EB$ = "2S": RETURN
2080 IF Z = 88 THEN E$ = "RADIO": C$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
3p(6) 3d(10)4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6)
5d(10) 6s(2)6p(6)7s(2)=[Rn] 7s(2)": D$ = "Ra": EB$ = "1S": RETURN

```

2090 IF Z=89 THEN E\$="ACTINIO":C\$="1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2) 3p(6)
 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10) 6s(2) 6p(6)
 6d(1)7s(2)=[Rn] 6d(1) 7s(2)": D\$ = "Ac": EB\$ = "2D3/2": RETURN
 2100 IF Z = 90 THEN E\$ = "TORIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10) 6s(2) 6p(6)
 6d(2) 7s(2) = [Rn] 6d(2) 7s(2)": D\$ = "Th": EB\$ = "3F2": RETURN
 2110 IF Z=91 THEN E\$="PROTACTINIO":C\$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
 3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2) 5p(6)5d(10)5f(2)6s(2)6p(6)
 6d(1) 7s(2)=[Rn] 5f(2) 6d(1) 7s(2)":D\$="Pa":EB\$="4K11/2": RETURN
 2120 IF Z=92 THEN E\$="URANIO":C\$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2) 3p(6)
 3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2)5p(6) 5d(10) 5f(3) 6s(2) 6p(6)
 6d(1) 7s(2) = [Rn] 5f(3) 6d(1) 7s(2)": D\$ = "U": EB\$ = "5L6": RETURN
 2130 IF Z=93 THEN E\$="NEPTUNIO":C\$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
 3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2)5p(6) 5d(10) 5f(4) 6s(2) 6p(6)
 6d(1) 7s(2) = [Rn] 5f(4) 6d(1) 7s(2)":D\$="Np":EB\$="6L11/2": RETURN
 2140 IF Z=94 THEN E\$="PLUTONIO":C\$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)3p(6)
 3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2)5p(6) 5d(10) 5f(6) 6s(2) 6p(6)
 7s(2) = [Rn] 5f(6) 7s(2)": D\$ = "Pu": EB\$ = "7F0": RETURN
 2150 IF Z = 95 THEN E\$ = "AMERICIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10)
 5f(7) 6s(2) 6p(6) 7s(2) = [Rn]5f(7)7s(2)":D\$="Am":EB\$="8S": RETURN
 2160 IF Z=96 THEN E\$="CURIO":C\$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)3p(6)
 3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2)5p(6) 5d(10) 5f(7) 6s(2) 6p(6)
 6d(1) 7s(2)=[Rn]5f(7)6d(1)7s(2)":D\$="Cm":EB\$="9D2": RETURN
 2170 IF Z=97 THEN E\$="BERKELIO":C\$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)3p(6)
 3d(10)4s(2)4p(6)4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10) 5f(9) 6s(2)
 6p(6) 7s(2) = [Rn] 5f(9) 7s(2)": D\$ = "Bk": EB\$ = "6H": RETURN
 2180 IF Z=98 THEN E\$="CALIFORNIO":C\$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
 3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10) 5f(10)
 6s(2) 6p(6) 7s(2) = [Rn] 5f(10) 7s(2)": D\$ = "Cf": EB\$ = "5I": RETURN
 2190 IF Z=99 THEN E\$="EINSTENIO":C\$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
 3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2)5p(6) 5d(10) 5f(11)
 6s(2) 6p(6) 7s(2) = [Rn] 5f(11) 7s(2)": D\$ = "Es": EB\$ = "4I": RETURN
 2200 IF Z = 100 THEN E\$ = "FERMIO": C\$ = "1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2)
 3p(6) 3d(10) 4s(2) 4p(6) 4d(19) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10) 5f(12)
 6s(2) 6p(6) 7s(2) = [Rn] 5f(12) 7s(2)":D\$="Fm": EB\$ = "3H": RETURN
 2210 IF Z=101 THEN E\$="MENDELEVIO":C\$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
 3p(6)3d(10)4s(2)4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10) 5f(13)
 6s(2) 6p(6) 7s(2) = [Rn]5f(13)7s(2)":D\$="Md":EB\$="2F": RETURN

```

2220 IF Z=102 THEN E$="NOBELIO":C$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)3p(6)
3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2) 5p(6) 5d(10) 5f(14) 6s(2)
6p(6) 7s(2) = [Rn] 5f(14) 7s(2)": D$="No":EB$="1S": RETURN
2230 IF Z=103 THEN E$="LAWRENCIO":C$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2) 5p(6)5d(10)5f(14)6s(2)6p(6)
6d(1) 7s(2) = [Rn] 5f(14) 6d(1) 7s(2)":D$="Lr":EB$="2D": RETURN
2240 IF Z=104 THEN E$="KURCHATOVIO":C$="1s(2)2s(2)2p(6)
3s(2)3p(6)3d(10)4s(2) 4p(6) 4d(10) 4f(14) 5s(2) 5p(6) 5d(10) 5f(14)
6s(2) 6p(6) 6d(2) 7s(2) = [Rn] 5f(14) 6d(2) 7s(2)":EB$="3F": RETURN
2250 IF Z=105 THEN E$="HAHNIO":C$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)3p(6)
3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2) 5p(6) 5d(10) 5f(14) 6s(2) 6p(6)
6d(3) 7s(2) = [Rn] 5f(14) 6d(3) 7s(2)":D$="Ha":EB$="4F": RETURN
2251 IF Z=106 THEN E$="UNILHEXIO":C$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2) 5p(6)5d(10)5f(14)6s(2) 6p(6)
6d(4) 7s(2) = [Rn] 5f(14) 6d(4) 7s(2)":D$="Unh":EB$="5D": RETURN
2252 IF Z=107 THEN E$="UNILSEPTIO":C$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2) 5p(6)5d(10)5f(14)6s(2) 6p(6)
6d(5) 7s(2) = [Rn] 5f(14) 6d(5) 7s(2)":D$="Uns":EB$="6S": RETURN
2253 IF Z=108 THEN E$="UNILECTIO":C$="1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)
3p(6)3d(10)4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2) 5p(6)5d(10)5f(14) 6s(2) 6p(6)
6d(6) 7s(2)=[Rn]5f(14) 6d(6) 7s(2)":D$="Uno":EB$="5D": RETURN
2254 IF Z=109 THEN E$="UNILENIO":C$="1s(2)2s(2)2p(6)3d(10)
4s(2)4p(6)4d(10)4f(14)5s(2)5p(6) 5d(10) 5f(14) 6s(2) 6p(6) 6d(7)
7s(2) = [Rn] 5f(14) 6d(7) 7s(2)": D$ = "Une": EB$ = "4F": RETURN
2260 EX=((INT(10*((2*ZX*NEX)-((NEX-1)*NEX*B))^2/(8*NEX*(NX^ 2))
* 10000))/1000)*(.01)
2280 PRINT
2290 PRINT , NX, TAB(35); EX
2300 T = T + EX: RETURN
2340 EX = -((INT(10*((2*ZX*NEX)-((NEX-1)*NEX*B))^2/(8*NEX * (NX^
2)) * 10000)) / 1000) * (.01)
2360 PRINT
2370 PRINT "", NX, TAB(35); EX
2380 T = T + EX
2390 PRINT
2410 PRINT " ENERGIA TOTAL"; TAB(35); T
2425 PRINT : INPUT "Deseas hacer otro cálculo (S/N)"; A$
2430 IF A$ = "s" OR A$ = "S" THEN GOTO 650
2435 GOTO 240

```

```
2440 CLS: SCREEN 1: LOCATE 10, 10:PRINT"ABANDONAS EL
PROGRAMA"
2441 LINE (5, 5)-(500, 5)
2442 LINE (5, 6)-(500, 6)
2443 LINE (5, 150)-(500, 150)
2444 LINE (5, 151)-(500, 151)
2445 LINE (5, 5)-(5, 150)
2446 LINE (6, 5)-(6, 150)
2447 LINE (319, 5)-(319, 150)
2448 LINE (318, 5)-(318, 150)
2450 LOCATE 22, 7: PRINT "Presiona ENTER para continuar"
2455 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 2455
2460 CLS : SCREEN 1: LOCATE 5, 12: PRINT "Teclea la palabra":
LOCATE 9, 14: PRINT "S Y S T E M": LOCATE 13, 13: PRINT "para
regresar al": LOCATE 15, 11: PRINT "al sistema operativo"
2461 LINE (5, 5)-(500, 5)
2462 LINE (5, 6)-(500, 6)
2463 LINE (5, 150)-(500, 150)
2464 LINE (5, 151)-(500, 151)
2465 LINE (5, 5)-(5, 150)
2466 LINE (6, 5)-(6, 150)
2467 LINE (319, 5)-(319, 150)
2468 LINE (318, 5)-(318, 150)
2470 LOCATE 22, 7: PRINT "Presiona ENTER para terminar"
2472 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 2472
2475 END
3000 CLS : SCREEN 1: COLOR 1, 5
3002 LINE (155, 96)-(159, 92): LINE (154, 96)-(158, 92)
3004 LOCATE 3, 5: PRINT "El primer POTENCIAL DE IONIZACION":
LOCATE 5, 8: PRINT " y la AFINIDAD ELECTRONICA": LOCATE 7,
8: PRINT "están expresados en Hartrees."
3006 LINE (84, 48)-(88, 45): LINE (83, 48)-(87, 45)
3007 LOCATE 13, 8: PRINT "El RADIO esta expresado": LOCATE
15, 11: PRINT "en radios de Bohr."
3008 LOCATE 21, 6: PRINT "Presiona ENTER para continuar"
3009 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 3009
3010 CLS : SCREEN 2: SCREEN 0: COLOR 0, 5: KEY OFF
3011 R1 = 0: R2 = 0: R3 = 0: R4 = 0
```

```

3012 LOCATE 4, 10: INPUT ""Cuál es el número atómico del primer
elemento que seleccionaste "; Z1
3014 A1 = INT(Z1): M1 = Z1 - A1: IF M1 <> 0 OR Z1 < 1 OR Z1 > 109
THEN GOTO 4000
3016 LOCATE 7, 10: INPUT ""Cuál es el número atómico del
segundo elemento que elegiste"; Z2
3018 A2=INT(Z2):M2=Z2-A2:IF M2<>0 OR Z2<1 OR Z2>109 THEN
GOTO 4000
3020 LOCATE 10, 10: INPUT ""Cuál es el número atómico del tercer
elemento que seleccionaste"; Z3
3025 A3 = INT(Z3): M3 = Z3 - A3: IF M3 <> 0 OR Z3 < 1 OR Z3 > 109
THEN GOTO 4000
3030 LOCATE 13, 10: INPUT ""Cuál es el número atómico del cuarto
elemento que elegiste "; Z4
3035 A4 = INT(Z4): M4 = Z4 - A4: IF M4 <> 0 OR Z4 < 1 OR Z4 > 109
THEN GOTO 4000
3040 LOCATE 20, 25: PRINT "Presiona  E N T E R "
3100 LOCATE 22,15: PRINT" y espera un momento para
CONTINUAR"
3120 FOR I = 1 TO Z1: READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA,
AFINA: NEXT I: RESTORE
3122 R1 = RADIO: E1 = ENERGIA: I1 = IONIZA: AF1 = AFINA
3123 LET Z = Z1: GOSUB 1210: LET NOM1$ = E$
3126 FOR I = 1 TO Z2: READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA,
AFINA: NEXT I: RESTORE
3128 R2 = RADIO: E2 = ENERGIA: I2 = IONIZA: AF2 = AFINA
3129 LET Z = Z2: GOSUB 1210: LET NOM2$ = E$
3132 FOR I = 1 TO Z3: READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA,
AFINA: NEXT I: RESTORE
3134 R3 = RADIO: E3 = ENERGIA: I3 = IONIZA: AF3 = AFINA
3135 LET Z = Z3: GOSUB 1210: LET NOM3$ = E$
3138 FOR I = 1 TO Z4: READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA,
AFINA: NEXT I: RESTORE
3140 R4 = RADIO: E4 = ENERGIA: I4 = IONIZA: AF4 = AFINA
3141 LET Z = Z4: GOSUB 1210: LET NOM4$ = E$
3142 CLS : SCREEN 1
3200 GOTO 3800
3500 IF VERT GOTO 3540
3510 CIRCLE (X, y), R, C, , , .07

```

```
3520 FOR J = 1 TO 5
3525 CIRCLE (X, y), R, C, , , J * .2: NEXT J
3530 IF VERT THEN RETURN
3540 CIRCLE (X, y), R, C, , , 1.3
3550 CIRCLE (X, y), R, C, , , 1.9
3560 CIRCLE (X, y), R, C, , , 3.6
3570 CIRCLE (X, y), R, C, , , 9.8
3580 IF VERT GOTO 3510
3650 RETURN
3800 CLS : SCREEN 1: COLOR 0, 1: KEY OFF
3880 X = 80: y = 50: C = 2: R = R1 * 8.7: GOSUB 3500
3890 X = 239: y = 50: R = R2 * 8.7: GOSUB 3500
3900 X = 80: y = 150: R = R3 * 8.7: GOSUB 3500
3910 X = 239: y = 150: R = R4 * 8.7: GOSUB 3500
3920 LINE (1, 98)-(399, 98), 1
3922 LINE (160, 1)-(160, 199), 1
3924 LINE (1, 199)-(319, 1), 1, B
3930 LOCATE 12,15:PRINT"Z=";Z1: LOCATE 1, 1: PRINT ""; NOM1$
3932 LOCATE 12,33:PRINT "Z=";Z2:LOCATE 1,22:PRINT ""; NOM2$
3934 LOCATE 23,15:PRINT"Z=";Z3:LOCATE 14, 1:PRINT ""; NOM3$
3936 LOCATE 23,33:PRINT"Z=";Z4:LOCATE 14,22:PRINT""; NOM4$
3938 IF INKEY$ = "" THEN 3938
3939 IF INKEY$ = "" THEN 3939
3940 LOCATE 2,1:PRINT"R=";R1:LOCATE 3,1:IF I1>0 THEN PRINT
"P="; I1
3942 LOCATE 4, 1: IF AF1 > 0 THEN PRINT "A="; AF1
3943 LOCATE 2, 22: PRINT "R="; R2: LOCATE 3, 22: IF I2 > 0 THEN
PRINT "P="; I2
3946 LOCATE 4, 22: IF AF2 > 0 THEN PRINT "A="; AF2
3947 LOCATE 15, 1: PRINT "R="; R3: LOCATE 16, 1: IF I3 > 0 THEN
PRINT "P="; I3
3949 LOCATE 17, 1: IF AF3 > 0 THEN PRINT "A="; AF3
3950 LOCATE 15, 22: PRINT "R="; R4: LOCATE 16, 22: IF I4 > 0
THEN PRINT "P="; I4
3954 LOCATE 17, 22: IF AF4 > 0 THEN PRINT "A="; AF4
3960 Z$ = INKEY$: IF Z$ = "" THEN 3960
3963 CLS : SCREEN 1: COLOR 1, 7
3964 LINE (25,74)-(25,75):LINE (25,75)-(23,76):LINE (23,76)-(23,78):
LINE (23, 78)-(27, 78): LINE (27, 78)-(27, 76): LINE (25, 70)-(25, 71)
```

```
3965 LINE (260, 68)-(256, 72): LINE (261, 68)-(257, 72)
3966 LOCATE 10,5:INPUT"Deseas hacer otra comparación(S/N)"; C$
3970 IF C$ = "s" OR C$ = "S" THEN GOTO 3010
3975 GOTO 240
4000 CLS
4002 LOCATE 12, 25: PRINT " Cometiste un error al registrar los":
LOCATE 14, 34: PRINT "NUMEROS ATOMICOS,"; LOCATE 16, 25:
PRINT "comienza de nuevo"
4005 IF INKEY$ = "" THEN 4005
4010 CLS : LOCATE 4, 34: PRINT " Recuerda que los NUMEROS
ATOMICOS deben ser valores enteros positivos, "; LOCATE 7, 20:
PRINT "con Z dentro del intervalo [1,109]"
4020 LOCATE 19, 12: PRINT "Para elegir nuevamente el intervalo
presiona E N T E R"
4025 IF INKEY$ = "" THEN 4025
4026 CLS
4030 LOCATE 19, 12: PRINT "Para elegir nuevamente el intervalo
presiona E N T E R"
4040 IF INKEY$ = "" THEN 4040
4050 GOTO 3010
4500 CLS
4502 LOCATE 12, 25: PRINT " Cometiste un error al registrar los":
LOCATE 14, 34: PRINT "NUMEROS ATOMICOS,"; LOCATE 16, 25:
PRINT "comienza de nuevo"
4505 IF INKEY$ = "" THEN 4505
4510 CLS : LOCATE 4, 34: PRINT " Recuerda que los NUMEROS
ATOMICOS deben ser valores enteros positivos, "; LOCATE 7, 20:
PRINT "con Z dentro del intervalo [1,109]"
4520 LOCATE 19, 12: PRINT "Para elegir nuevamente el intervalo
presiona E N T E R"
4525 IF INKEY$ = "" THEN 4525
4526 CLS
4530 LOCATE 11, 12: PRINT " El primer valor que escoges para Z
debe ser menor que el segundo": LOCATE 20, 12: PRINT "Para elegir
nuevamente el intervalo presiona E N T E R"
4540 IF INKEY$ = "" THEN 4540
4550 GOTO 7362
5000 CLS
```

```
5002 LOCATE 12, 25: PRINT " Cometiste un error al registrar los":  
LOCATE 14, 34: PRINT "NUMEROS ATOMICOS,": LOCATE 16, 25:  
PRINT "comienza de nuevo"  
5005 IF INKEY$ = "" THEN 5005  
5010 CLS : LOCATE 4, 34: PRINT " Recuerda que los NUMEROS  
ATOMICOS deben ser valores enteros positivos, ": LOCATE 7, 20:  
PRINT "con Z dentro del intervalo [1,109]"  
5020 LOCATE 19, 12: PRINT "Para elegir nuevamente el intervalo  
presiona E N T E R"  
5022 IF INKEY$ = "" THEN 5022  
5025 CLS  
5030 LOCATE 11, 12: PRINT " El primer valor que escoges para Z  
debe ser menor que el segundo": LOCATE 20, 12: PRINT "Para elegir  
nuevamente el intervalo presiona E N T E R"  
5040 IF INKEY$ = "" THEN 5040  
5050 GOTO 9361  
5500 CLS  
5502 LOCATE 12, 25: PRINT " Cometiste un error al registrar los":  
LOCATE 14, 34: PRINT "NUMEROS ATOMICOS,": LOCATE 16, 25:  
PRINT "comienza de nuevo"  
5505 IF INKEY$ = "" THEN 5505  
5510 CLS : LOCATE 4, 34: PRINT " Recuerda que los NUMEROS  
ATOMICOS deben ser valores enteros positivos, ": LOCATE 7, 20:  
PRINT "con Z dentro del intervalo [1,109]"  
5520 LOCATE 19, 12: PRINT "Para elegir nuevamente el intervalo  
presiona E N T E R"  
5525 IF INKEY$ = "" THEN 5525  
5526 CLS  
5530 LOCATE 11, 12: PRINT " El primer valor que escoges para Z  
debe ser menor que el segundo": LOCATE 20, 12: PRINT "Para elegir  
nuevamente el intervalo presiona E N T E R"  
5540 IF INKEY$ = "" THEN 5540  
5550 GOTO 12362  
7000 KEY OFF: SCREEN 2: CLS  
7020 WINDOW (0, 0)-(319, 199)  
7042 RESTORE  
7043 MAX = 0  
7050 FOR I = 1 TO 109  
7060 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
```

```
7070 IF MAX < RADIO THEN MAX = RADIO
7080 NEXT I
7090 RESTORE
7120 FOR I = 1 TO 109
7130 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
7170 HEIGHT = 145 * RADIO / 4.62
7180 LEFT = 2.5 * I - 1: RIGHT = 2.5 * I
7190 IF I = 1 THEN LINE (41, 25)-(41, 25 + HEIGHT)
7195 LINE -(41 + (2.5 * I - 1), -12 + HEIGHT), 3
7200 NEXT I
7210 LOCATE 2, 35
7220 PRINT "GRAFICA DE RADIOS DE TODOS LOS ELEMENTOS"
7230 LINE (41, 180)-(43, 180)
7235 LINE (41, 164)-(43, 164)
7240 LINE (41, 148)-(43, 148)
7245 LINE (41, 132)-(43, 132)
7250 LINE (41, 116)-(43, 116)
7255 LINE (41, 100)-(43, 100)
7260 LINE (41, 84)-(43, 84)
7270 LINE (41, 52)-(43, 52)
7271 LINE (41, 35)-(43, 35)
7275 LINE (41, 20)-(43, 20)
7280 LINE (41, 11)-(41, 185)
7290 LINE (41, 11)-(317, 11)
7291 LINE (41, 11)-(43, 11)
7292 LINE (41, 68)-(43, 68)
7300 LOCATE 1, 8: PRINT "RADIO": LOCATE 2, 6: PRINT "(radio de
Bohr)"
7310 LOCATE 3, 1: PRINT "6.00"
7320 LOCATE 11, 1: PRINT "4.00"
7330 LOCATE 7, 1: PRINT "5.00"
7340 LOCATE 19, 1: PRINT "2.00"
7345 LOCATE 23, 1: PRINT "1.00"
7346 LOCATE 15, 1: PRINT "3.00"
7350 LOCATE 15, 1: PRINT "20.0"
7352 FOR K = 1 TO 11
7353 LINE (39 + 25 * K, 10)-(39 + 25 * K + 1, 13), , BF
7354 NEXT K
7355 LOCATE 22, 23: PRINT "20": LOCATE 22, 35: PRINT "40"
```

```

7356 LOCATE 22, 48: PRINT "60": LOCATE 22, 60: PRINT "80":
LOCATE 22, 72: PRINT "100"
7358 LOCATE 20, 67: PRINT "NUMERO ATOMICO"
7360 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 7360
7362 CLS
7363 LINE (41,88)-(41,89):LINE (41,85)-(41,84):LINE (41,84)-(40,83):
LINE (40, 83)-(40, 81): LINE (40, 81)-(42, 81): LINE (42, 81)-(42, 82)
7370 LOCATE 15, 13: INPUT "DESEAS SELECCIONAR ALGUN
INTERVALO DE NUMEROS ATOMICOS(S/N)"; C$
7375 IF C$ = "S" OR C$ = "s" THEN GOTO 8000
7377 GOTO 240
8000 KEY OFF: SCREEN 2: CLS
8010 WINDOW (0, 0)-(319, 199)
8020 RESTORE
8039 LINE (243, 95)-(247, 97)
8040 LINE (210, 95)-(214, 97)
8041 LINE (168, 95)-(172, 97)
8042 LINE (180, 63)-(184, 65)
8043 LINE (128, 63)-(132, 65)
8044 MAX = 0
8045 LOCATE 2, 34: PRINT "    Recuerda que los NUMEROS
ATOMICOS deben ser valores enteros positivos, ": LOCATE 5, 20:
PRINT "con Z dentro del intervalo [1,109]"
8046 LOCATE 12, 20: PRINT "Para elegir los valores de Z del
intervalo": LOCATE 14, 16: PRINT "registra primero el valor mínimo
del número atómico": LOCATE 16, 37: PRINT " y": LOCATE 18, 28:
PRINT "después el valor máximo"
8047 IF INKEY$ = "" THEN 8047
8048 CLS
8049 LOCATE 20, 12: PRINT "Después de registrar los valores,
presiona E N T E R"
8050 LINE (65, 48)-(69, 50)
8055 LOCATE 6, 15: INPUT "EI NUMERO ATOMICO del elemento al
inicio del intervalo es ", ENT
8060 LOCATE 8, 15: INPUT "EI NUMERO ATOMICO del elemento al
final del intervalo es ", FIN
8062 IF ENT > FIN THEN GOTO 4500
8063 IF ENT < 0 OR ENT - INT(ENT) <> 0 OR ENT < 1 OR ENT >
109 THEN GOTO 4500

```

```
8064 IF FIN < 0 OR FIN - INT(FIN) <> 0 OR FIN < 1 OR FIN > 109
THEN GOTO 4500
8070 KEY OFF: SCREEN 2: CLS
8080 WINDOW (0, 0)-(319, 199)
8294 MAX = 0
8296 FOR I = ENT TO FIN
8298 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
8300 IF MAX < RADIO THEN MAX = RADIO
8305 NEXT I
8310 RESTORE
8312 LINE (40 + 2.5 * ENT - 1, 18)-(40 + 2.5 * ENT - 1, 18)
8313 FOR I = 1 TO ENT - 1
8314 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
8315 LINE (40 + 2.5 * I - 1, 10)-(40 + 2.5 * I, 10)
8316 NEXT I
8320 FOR I = ENT TO FIN
8325 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
8340 LINE -(40 + (2.5 * I - 1), -12 + (145 * RADIO / 4.62)), 3
8345 LINE (40 + 2.5 * I - 1, -12 + (145 * RADIO / 4.62))-(40 + 2.5 * I, -
12 + (145 * RADIO / 4.62)), 3
8370 NEXT I
8380 LOCATE 2, 35: PRINT "GRAFICA DE RADIOS DE LOS
ELEMENTOS"
8390 LOCATE 3, 40: PRINT " DE Z =", ENT, " A Z =", FIN
8400 LINE (41, 180)-(43, 180)
8405 LINE (41, 164)-(43, 164)
8410 LINE (41, 148)-(43, 148)
8415 LINE (41, 132)-(43, 132)
8420 LINE (41, 116)-(43, 116)
8425 LINE (41, 100)-(43, 100)
8430 LINE (41, 84)-(43, 84)
8432 LINE (41, 52)-(43, 52)
8433 LINE (41, 35)-(43, 35)
8434 LINE (41, 11)-(43, 11)
8435 LINE (41, 68)-(43, 68)
8436 LINE (41, 11)-(41, 185)
8437 LINE (41, 20)-(43, 20)
8440 LINE (41, 11)-(317, 11)
```

```
8444 LOCATE 1, 8: PRINT "RADIO": LOCATE 2, 6: PRINT "(radio de
Bohr)"
8446 FOR K = 1 TO 12
8448 LINE (39 + (25 * K), 10)-(39 + (25 * K) + 1, 13), , BF
8450 NEXT K
8452 LOCATE 22, 23: PRINT "20": LOCATE 22, 34: PRINT "40"
8454 LOCATE 22, 47: PRINT "60": LOCATE 22, 60: PRINT "80":
LOCATE 22, 72: PRINT "100"
8456 LOCATE 20, 67: PRINT "NUMERO ATOMICO"
8458 LOCATE 3, 1: PRINT "6.00"
8460 LOCATE 11, 1: PRINT "4.00"
8462 LOCATE 7, 1: PRINT "5.00"
8464 LOCATE 19, 1: PRINT "2.00"
8465 LOCATE 23, 1: PRINT "1.00"
8466 LOCATE 15, 1: PRINT "3.00"
8468 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 8468
8470 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 7362
9000 KEY OFF: SCREEN 2: CLS
9020 WINDOW (0, 0)-(319, 199)
9042 RESTORE
9043 MAX = 0
9050 FOR I = 1 TO 109
9060 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
9070 IF MAX < ENERGIA THEN MAX = ENERGIA
9080 NEXT I
9090 RESTORE
9120 FOR I = 1 TO 109
9130 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
9170 HEIGHT = -162 * ENERGIA / MAX + 154
9180 LEFT = 2.5 * I - 1: RIGHT = 2.5 * I
9190 IF I = 1 THEN LINE (41, 25)-(41, 25 + HEIGHT)
9195 LINE -(40 + (2.5 * I - 1), 25 + HEIGHT), 3
9200 NEXT I
9210 LOCATE 10, 15: PRINT "GRAFICA DE ENERGIAS TOTALES"
9220 LOCATE 11, 16: PRINT " DE TODOS LOS ELEMENTOS"
9230 LINE (39, 180)-(41, 180)
9240 LINE (39, 148)-(41, 148)
9250 LINE (39, 116)-(41, 116)
9260 LINE (39, 84)-(41, 84)
```

```

9270 LINE (39, 52)-(41, 52)
9280 LINE (39, 20)-(41, 20)
9290 LINE (39, 20)-(39, 185)
9295 LINE (39, 180)-(317, 180)
9300 LOCATE 22, 14: PRINT "ENERGIA TOTAL": LOCATE 23, 15:
PRINT " (Hartree)"
9310 LOCATE 3, 1: PRINT "0.0"
9320 LOCATE 7, 1: PRINT "-8000.0"
9330 LOCATE 11, 1: PRINT "-16000.0"
9340 LOCATE 19, 1: PRINT "-32000.0"
9345 LOCATE 15, 1: PRINT "-24000.0"
9350 LOCATE 23, 1: PRINT "-40000.0"
9352 FOR K = 1 TO 22
9353 LINE (39 + (12.5 * (K)), 179)-(39 + (12.5 * (K)) + 1, 181), , BF
9354 NEXT K
9355 LOCATE 2, 35: PRINT "40": LOCATE 2, 22: PRINT "20"
9356 LOCATE 2, 48: PRINT "60": LOCATE 2, 60: PRINT "80":
LOCATE 2, 72: PRINT "100"
9358 LOCATE 4, 65: PRINT "NUMERO ATOMICO"
9360 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 9360
9361 CLS
9363 LINE (41, 88)-(41, 89):LINE (41, 85)-(41, 84):LINE (41, 84)-(40,
83):LINE (40, 83)-(40, 81):LINE (40,81)-(42, 81):LINE (42, 81)-(42, 82)
9365 LOCATE 15, 13: INPUT "DESEAS SELECCIONAR ALGUN
INTERVALO DE NUMEROS ATOMICOS(S/N)"; C$
9370 IF C$ = "S" OR C$ = "s" THEN GOTO 9400
9377 GOTO 240
9400 KEY OFF: SCREEN 2: CLS
9420 WINDOW (0, 0)-(319, 199)
9422 RESTORE
9424 LINE (243, 95)-(247, 97)
9426 LINE (210, 95)-(214, 97)
9428 LINE (168, 95)-(172, 97)
9430 LINE (180, 63)-(184, 65)
9432 LINE (128, 63)-(132, 65)
9434 LOCATE 2, 34: PRINT "      Recuerda que los NUMEROS
ATOMICOS deben ser valores enteros positivos, ": LOCATE 5, 20:
PRINT "con Z dentro del intervalo [1,109]"

```

```
9436 LOCATE 12, 20: PRINT "Para elegir los valores de Z del
intervalo": LOCATE 14, 16: PRINT "registra primero el valor mínimo
del número atómico": LOCATE 16, 37: PRINT " y": LOCATE 18, 28:
PRINT "después el valor máximo"
9438 IF INKEY$ = "" THEN 9438
9440 CLS
9442 LOCATE 20, 12: PRINT "Después de registrar los valores,
presiona E N T E R"
9446 LINE (65, 48)-(69, 50)
9543 MAX = 0
9550 LOCATE 10, 15: INPUT "El NUMERO ATOMICO del elemento
al inicio del intervalo es ", ENT
9560 LOCATE 12, 15: INPUT "El NUMERO ATOMICO del elemento
al final del intervalo es ", FIN
9562 IF ENT > FIN THEN GOTO 5000
9564 IF ENT < 0 OR ENT - INT(ENT) <> 0 OR ENT < 1 OR ENT >
109 THEN GOTO 5000
9566 IF FIN < 0 OR FIN - INT(FIN) <> 0 OR FIN < 1 OR FIN > 109
THEN GOTO 5000
10000 KEY OFF: SCREEN 2: CLS
10002 WINDOW (0, 0)-(319, 199)
10009 V = 0: W = 0
10010 RESTORE
10011 FOR I = 1 TO FIN
10012 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
10013 IF V < ENERGIA THEN V = ENERGIA
10016 NEXT I: LOCATE 21, 1: PRINT "- "; V
10017 RESTORE
10018 FOR I = 1 TO ENT
10019 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
10020 IF W < ENERGIA THEN W = ENERGIA
10021 NEXT I
10025 IF V = W THEN GOTO 10042
10032 LOCATE 3, 1: PRINT "- "; W
10033 LOCATE 11, 1: PRINT ""
10042 RESTORE
10043 MAX = 0
10050 FOR I = ENT TO FIN
10060 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
```

```
10070 IF MAX < ENERGIA THEN MAX = ENERGIA
10080 NEXT I
10090 RESTORE
10092 LINE (40 + 2.5 * ENT - 1, 180)-(40 + 2.5 * ENT - 1, 180)
10120 FOR I = ENT TO FIN
10130 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
10170 HEIGHT = -147 * ENERGIA / MAX + 150
10180 LEFT = 2.5 * I - 1: RIGHT = 2.5 * I
10185 LINE -(40 + (2.5 * I - 1), 30 + HEIGHT), 3
10195 LINE (40 + LEFT, 30 + HEIGHT)-(40 + RIGHT, 30 + HEIGHT), 3
10200 NEXT I
10210 LOCATE 22, 35: PRINT "GRAFICA DE ENERGIAS TOTALES
DE LOS ELEMENTOS"
10220 LOCATE 23, 40: PRINT " DE Z =": ENT; " A Z =": FIN
10230 LINE (39, 180)-(317, 180)
10240 LINE (39, 25)-(39, 180)
10250 LINE (39, 172)-(41, 172)
10260 LINE (39, 58)-(41, 58)
10265 LINE (39, 33)-(41, 33)
10267 LINE (39, 32)-(41, 32)
10270 LINE (39, 86)-(41, 86)
10280 LINE (39, 114)-(41, 114)
10290 LINE (39, 142)-(41, 142)
10300 LOCATE 11, 1: PRINT "ENERGIA": LOCATE 12, 2: PRINT
"TOTAL": LOCATE 14, 1: PRINT "(Hartree)"
10335 FOR K = 1 TO 24
10338 LINE (39 + (12.5 * K), 179)-(39 + (12.5 * K) + 1, 181), , BF
10339 NEXT K
10355 LOCATE 2, 22: PRINT "20": LOCATE 2, 34: PRINT "40"
10356 LOCATE 2, 47: PRINT "60": LOCATE 2, 72: PRINT "100"
10358 LOCATE 1, 55: PRINT "NUMERO ATOMICO"
10360 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 10360
10362 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 9365
12000 KEY OFF: SCREEN 2: CLS
12020 WINDOW (0, 0)-(319, 199)
12042 RESTORE
12043 MAX = 0
12050 FOR I = 1 TO 109
12060 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
```

```
12070 IF MAX < IONIZA THEN MAX = IONIZA
12080 NEXT I
12090 RESTORE
12120 FOR I = 1 TO 109
12130 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
12170 HEIGHT = 145 * IONIZA / MAX
12180 LEFT = 2.5 * I - 1: RIGHT = 2.5 * I
12190 IF I = 1 THEN LINE (41, 20)-(41, 20 + HEIGHT)
12195 LINE -(41 + (2.5 * I - 1), 20 + HEIGHT), 3
12200 NEXT I
12210 LOCATE 2, 35: PRINT "GRAFICA DE PRIMER POTENCIAL
DE IONIZACION"
12220 LOCATE 3, 40: PRINT "DE TODOS LOS ELEMENTOS"
12230 LINE (41, 180)-(43, 180)
12240 LINE (41, 148)-(43, 148)
12250 LINE (41, 116)-(43, 116)
12260 LINE (41, 84)-(43, 84)
12270 LINE (41, 52)-(43, 52)
12275 LINE (41, 20)-(43, 20)
12280 LINE (41, 20)-(41, 185)
12290 LINE (41, 20)-(317, 20)
12295 LINE (85, 192)-(88, 194)
12300 LOCATE 1, 3: PRINT "Primer Potencial": LOCATE 2, 11:
PRINT "de Ionizacion": LOCATE 3, 14: PRINT "(Hartree)"
12310 LOCATE 3, 1: PRINT "1.00"
12320 LOCATE 11, 1: PRINT "0.60"
12330 LOCATE 7, 1: PRINT "0.80"
12340 LOCATE 19, 1: PRINT "0.20"
12345 LOCATE 23, 1: PRINT "0.0"
12350 LOCATE 15, 1: PRINT "0.40"
12352 FOR K = 1 TO 22
12353 LINE (39 + 12.5 * K, 18)-(39 + 12.5 * K + 1, 21), , BF
12354 NEXT K
12355 LOCATE 22, 23: PRINT "20": LOCATE 22, 35: PRINT "40"
12356 LOCATE 22, 48: PRINT "60": LOCATE 22, 60: PRINT "80":
LOCATE 22, 72: PRINT "100"
12358 LOCATE 21, 48: PRINT "NUMERO ATOMICO"
12360 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 12360
12362 CLS
```

```
12363 LINE(41, 88)-(41, 89):LINE (41,85)-(41,84):LINE (41,84)-(40,
83):LINE(40,83)-(40, 81):LINE (40, 81)-(42, 81): LINE (42, 81)-(42, 82)
12365 LOCATE 15, 13: INPUT "DESEAS SELECCIONAR ALGUN
INTERVALO DE NUMEROS ATOMICOS(S/N)"; C$
12366 LINE (41, 88)-(41, 89): LINE (41, 85)-(41, 84):LINE (41,84)-(40,
83): LINE (40, 83)-(40, 81):LINE (40,81)-(42,81):LINE (42,81)-(42, 82)
12370 IF C$ = "S" OR C$ = "s" THEN GOTO 12500
12377 GOTO 240
12500 KEY OFF: SCREEN 2: CLS
12520 WINDOW (0, 0)-(319, 199)
12522 RESTORE
12524 LINE (243, 95)-(247, 97)
12526 LINE (210, 95)-(214, 97)
12528 LINE (168, 95)-(172, 97)
12530 LINE (180, 63)-(184, 65)
12532 LINE (128, 63)-(132, 65)
12534 MAX = 0
12536 LOCATE 2, 34: PRINT "    Recuerda que los NUMEROS
ATOMICOS deben ser valores enteros positivos, ": LOCATE 5, 20:
PRINT "con Z dentro del intervalo [1,109]"
12538 LOCATE 12, 20: PRINT "Para elegir los valores de Z del
intervalo": LOCATE 14, 16: PRINT "registra primero el valor mínimo
del número atómico": LOCATE 16, 37: PRINT " y": LOCATE 18, 28:
PRINT "después el valor máximo"
12540 IF INKEY$ = "" THEN 12540
12542 CLS
12544 LOCATE 20, 12: PRINT "Después de registrar los valores,
presiona E N T E R"
12546 LINE (65, 48)-(69, 50)
12550 LOCATE 6, 15: INPUT "El NUMERO ATOMICO del elemento
al inicio del intervalo es ", ENT
12560 LOCATE 8, 15: INPUT "El NUMERO ATOMICO del elemento
al final del intervalo es ", FIN
12562 IF ENT > FIN THEN GOTO 5500
12564 IF ENT < 0 OR ENT - INT(ENT) <> 0 OR ENT < 1 OR ENT >
109 THEN GOTO 5500
12568 IF FIN < 0 OR FIN - INT(FIN) <> 0 OR FIN < 1 OR FIN > 109
THEN GOTO 5500
13000 KEY OFF: SCREEN 2: CLS
```

```
13002 WINDOW (0, 0)-(319, 199)
13009 MAX = 0
13010 FOR I = ENT TO FIN
13011 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
13012 IF MAX < IONIZA THEN MAX = IONIZA
13013 NEXT I
13016 RESTORE
13017 LINE (40 + 2.5 * ENT - 1, 20)-(40 + 2.5 * ENT - 1, 20)
13018 FOR I = 1 TO ENT - 1
13019 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
13020 LINE (40 + 2.5 * I - 1, 20)-(40 + 2.5 * I, 20)
13021 NEXT I
13022 FOR I = ENT TO FIN
13023 READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA, AFINA
13024 LINE -(41 + (2.5 * I - 1), 20 + (145 * IONIZA)), 3
13042 NEXT I
13043 LOCATE 2, 35: PRINT "GRAFICA DE POTENCIALES DE
IONIZACION"
13050 LOCATE 3, 40: PRINT " DE Z =", ENT; " A Z =", FIN
13060 LINE (41, 180)-(43, 180)
13065 LINE (41, 148)-(43, 148)
13070 LINE (41, 116)-(43, 116)
13080 LINE (41, 84)-(43, 84)
13090 LINE (41, 52)-(43, 52)
13092 LINE (41, 20)-(43, 20)
13120 LINE (41, 20)-(41, 185)
13130 LINE (41, 20)-(317, 20)
13200 FOR K = 1 TO 12
13210 LINE (39 + (25 * K), 18)-(39 + (25 * K) + 1, 21), , BF
13220 NEXT K
13250 LOCATE 22, 23: PRINT "20": LOCATE 22, 34: PRINT "40"
13260 LOCATE 22, 47: PRINT "60": LOCATE 22, 60: PRINT "80":
LOCATE 22, 72: PRINT "100"
13263 LINE (85, 192)-(88, 194)
13264 LOCATE 1, 3: PRINT "Primer Potencial": LOCATE 2, 11:
PRINT "de Ionización": LOCATE 3, 14: PRINT "(Hartree)"
13265 LOCATE 21, 48: PRINT "NUMERO ATOMICO"
13267 LOCATE 3, 1: PRINT "1.00"
13270 LOCATE 11, 1: PRINT "0.60"
```

```

13280 LOCATE 7, 1: PRINT "0.80"
13290 LOCATE 19, 1: PRINT "0.20"
13300 LOCATE 23, 1: PRINT "0.0"
13335 LOCATE 15, 1: PRINT "0.40"
13360 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 13360
13362 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 12362
15000 CLS : SCREEN 2: SCREEN 0: COLOR 2, 0
15010 INPUT ""Cuál es el número atómico del elemento "; Z
15020 A = INT(Z): M = Z - A: IF M <> 0 THEN LOCATE 6, 10: PRINT
"- EL NUMERO ATOMICO ES ERRONEO !": LOCATE 10, 10: PRINT
"NO EXISTE ELEMENTO ALGUNO CON TAL VALOR DE Z":
LOCATE 14, 25: PRINT "- COMIENZA DE NUEVO !": GOTO 17800
15030 IF Z < 1 OR Z > 109 THEN LOCATE 10, 25: PRINT "- EL
NUMERO ATOMICO ES ERRONEO !": LOCATE 14, 15: PRINT "NO
EXISTE ELEMENTO ALGUNO CON TAL VALOR DE Z": LOCATE
16, 25: PRINT "- COMIENZA DE NUEVO !": GOTO 17800
15040 GOSUB 1210
15060 LOCATE 3, 18: PRINT "El ELEMENTO es el "; E$
15062 LOCATE 9, 18: PRINT "El ESTADO BASE es "; EB$
15065 LOCATE 4, 18: PRINT "NUMERO ATOMICO      Z="; Z:
LOCATE 5, 18: PRINT "SIMBOLO                "; D$: LOCATE 5, 16:
PRINT "CONFIGURACION ELECTRONICA            "; C$
15075 PRINT
15080 FOR I = 1 TO Z: READ ELEM$, RADIO, ENERGIA, IONIZA,
AFINA: NEXT I: RESTORE
15090 R1 = RADIO: E1 = ENERGIA: I1 = IONIZA: A1 = AFINA
15095 LOCATE 11, 8: PRINT "ENERGIA TOTAL, en Hartrees,":
LOCATE 14, 8: PRINT "RADIO de la órbita más externa, en radios de
Bohr,": LOCATE 17, 8: PRINT "PRIMER POTENCIAL DE
IONIZACION, en Hartrees,"
15100 LOCATE 12, 25: PRINT "es E="; E1: LOCATE 15, 25: PRINT
"es R="; R1: LOCATE 18, 25: IF I1 = 0 THEN PRINT "no se conoce"
15110 LOCATE 18, 25: IF I1 > 0 THEN PRINT "es P="; I1
15120 LOCATE 20, 8: PRINT "AFINIDAD ELECTRONICA, expresada
en Hartrees,"
15130 LOCATE 21, 25: IF A1 <> 0 THEN PRINT "es AE="; A1
15135 LOCATE 21, 25: IF A1 = 0 THEN PRINT "no se conoce"
15140 PRINT

```

```
15200 PRINT : INPUT ""Deseas conocer las características de otro
elemento (S/N)"; A$
15210 IF A$ = "s" OR A$ = "S" THEN GOTO 15000
15220 GOTO 240
17800 PRINT : INPUT ""Deseas conocer las características de otro
elemento (S/N)"; A$
18010 IF A$ = "s" OR A$ = "S" THEN GOTO 15000
18020 GOTO 240
23380 DATA H001,1,0.5,0.50,0.0277
23390 DATA He02,0.940,2.91,0.90,0
23400 DATA Li03,3.752,7.45,0.20,0.2271
23410 DATA Be04,2.609,14.47,0.34,0
23420 DATA B05,2.255,24.34,0.30,0.0102
23430 DATA C06,1.719,37.44,0.41,0.0464
23440 DATA N07,1.409,54.15,0.53,0
23450 DATA O08,1.203,74.83,0.50,0.0537
23460 DATA F09,1.050,99.86,0.64,0.1250
23470 DATA Ne10,0.934,129.63,0.79,0
23480 DATA Na11,4.021,163.00,0.19,0.0201
23490 DATA Mg12,3.122,200.58,0.28,0
23500 DATA Al13,3.434,242.54,0.22,0.0162
23510 DATA Si14,2.707,289.05,0.30,0.0509
23520 DATA P15,2.282,340.27,0.385,0.0274
23530 DATA S16,1.986,396.37,0.38,0.0763
23540 DATA Cl17,1.766,457.51,0.48,0.1328
23550 DATA Ar18,1.752,523.87,0.58,0
23560 DATA K19,4.939,594.95,0.16,0.0184
23570 DATA Ca20,3.970,671.03,0.22,0.0016
23580 DATA Sc21,3.706,753.73,0.24,0.0069
23590 DATA Ti22,3.507,842.29,0.25,0.0029
23600 DATA V23,3.346,936.87,0.25,0.0193
23610 DATA Cr24,3.559,1039.45,0.25,0.0245
23620 DATA Mn25,3.085,1144.79,0.27,0
23630 DATA Fe26,2.977,1258.45,0.29,0.0055
23640 DATA Co27,2.879,1378.81,0.29,0.0243
23650 DATA Ni28,2.791,1506.03,0.28,0.0425
23660 DATA Cu29,3.006,1643.20,0.28,0.0453
23670 DATA Zn30,2.633,1781.71,0.345,0
23680 DATA Ga31,3.361,1926.43,0.22,0.0110
```

23690 DATA Ge32,2.780,2077.46,0.29,0.0453
23700 DATA As33,2.479,2234.88,0.36,0.0298
23710 DATA Se34,2.223,2398.81,0.36,0.0743
23720 DATA Br35,2.030,2569.32,0.43,0.1236
23730 DATA Kr36,1.877,2746.51,0.51,0
23740 DATA Rb37,5.197,2930.11,0.15,0.0179
23750 DATA Sr38,4.266,3120.29,0.21,0.0040
23760 DATA Y39,3.925,3317.92,0.23,0.0113
23770 DATA Zr40,3.699,3522.60,0.25,0.0157
23780 DATA Nb41,3.805,3735.31,0.25,0.0328
23790 DATA Mo42,3.661,3954.47,0.26,0.0274
23800 DATA Tc43,3.267,4180.97,0.27,0.0202
23810 DATA Ru44,3.430,4414.90,0.27,0.0386
23820 DATA Rh45,3.339,4656.34,0.275,0.0418
23830 DATA Pd46,1.501,4906.58,0.31,0.0205
23840 DATA Ag47,3.180,5162.17,0.28,0.0478
23850 DATA Cd48,2.845,5424.95,0.33,0
23860 DATA In49,3.582,5695.00,0.21,0.0110
23870 DATA Sn50,3.061,5972.37,0.27,0.0409
23880 DATA Sb51,2.872,6257.13,0.32,0.0393
23890 DATA Te52,2.610,6549.32,0.33,0.0724
23900 DATA I53,2.413,6849.02,0.385,0.1124
23910 DATA Xe54,2.253,7156.27,0.45,0
23920 DATA Cs55,5.664,7465.11,0.125,0.0173
23930 DATA Ba56,4.715,7793.06,0.19,0.0055
23940 DATA La57,4.368,8123.25,0.205,0.0184
23950 DATA Ce58,4.301,8474.84,0.20,0
23960 DATA Pr59,4.239,8828.86,0.20,0
23970 DATA Nd60,4.420,9191.76,0.20,0
23980 DATA Pm61,4.360,9563.63,0.20,0
23990 DATA Sm62,4.304,9944.56,0.21,0
24000 DATA Eu63,4.359,10334.66,0.21,0
24010 DATA Gd64,4.053,10724.88,0.225,0
24020 DATA Tb65,4.253,11142.7,0.215,0
24030 DATA Dy66,4.203,11560.84,0.22,0
24040 DATA Ho67,4.049,11988.52,0.22,0
24050 DATA Er68,4.002,12425.82,0.22,0
24060 DATA Tm69,3.582,12872.84,0.23,0
24070 DATA Yb70,3.911,13329.68,0.23,0

24080 DATA Lu71,3.620,13784.25,0.20,0
24090 DATA Hf72,3.427,14247.5,0.26,0
24100 DATA Ta73,3.278,14719.47,0.29,0.0118
24110 DATA W74,3.154,15200.23,0.29,0.0300
24120 DATA Re75,3.041,15689.84,0.30,0.0037
24130 DATA Os76,2.942,16188.37,0.32,0.0404
24140 DATA Ir77,2.854,16695.8,0.335,0.0575
24150 DATA Pt78,2.918,17212.3,0.33,0.0782
24160 DATA Au79,2.843,17739.03,0.34,0.0848
24170 DATA Hg80,2.636,18272.75,0.38,0
24180 DATA Tl81,3.394,18815.29,0.225,0.0074
24190 DATA Pb82,2.977,19366.67,0.27,0.0134
24200 DATA Bi83,3.166,19926.96,0.27,0.0348
24210 DATA Po84,2.869,20496.19,0.31,0.0698
24220 DATA At85,2.654,21074.4,0.35,0.1029
24230 DATA Rn86,2.486,21661.63,0.395,0
24240 DATA Fr87,5.530,22257.77,0.15,0.0169
24250 DATA Ra88,4.667,22862.88,0.195,0
24260 DATA Ac89,4.278,23477.36,0.25,0
24270 DATA Th90,4.014,24101.82,0.255,0
24280 DATA Pa91,4.106,24742.8,0,0
24290 DATA U92,4.036,25390.26,0.25,0
24300 DATA Np93,3.971,26047.61,0,0
24310 DATA Pu94,4.133,26714.92,0.21,0
24320 DATA Am95,4.075,27392.25,0.22,0
24330 DATA Cm96,3.798,28079.65,0,0
24340 DATA Bk97,3.743,28777.2,0,0
24350 DATA Cf98,3.916,29484.95,0,0
24360 DATA Es99,3.868,30202.95,0,0
24370 DATA Fm100,3.587,30931.27,0,0
24380 DATA Md101,3.772,31669.98,0,0
24390 DATA Nb102,3.726,32419.11,0,0
24400 DATA Lw103,3.438,33178.76,0,0
24410 DATA Ku104,3.249,33940.82,0,0
24420 DATA Ha105,3.099,34712.67,0,0
24430 DATA Unh106,2.973,35494.35,0,0
24440 DATA Uns107,2.847,36285.9,0,0
24450 DATA Uno108,2.737,37087.36,0,0
24460 DATA Une109,2.639,37898.78,0,0

```

24480 DATA Un110,0.0,0.0,0.0,0
25000 CLS : LOCATE 4, 34: PRINT "  Recuerda que los NUMEROS
ATOMICOS deben ser valores enteros positivos, ":LOCATE 7,20:
PRINT"con Z dentro del intervalo [1,109], ": LOCATE 9, 38: PRINT "y"
25002 LOCATE 11, 12: PRINT " el primer valor escogido para Z debe
ser menor que el segundo": LOCATE 20, 12: PRINT "Para elegir
nuevamente el intervalo presiona E N T E R"
25006 IF INKEY$ = "" THEN 25006
25008 GOTO 8000
55000 CLS
55020 GOTO 55160
55050 IF VERT GOTO 55100
55060 CIRCLE (X, y), R, C, , , .07
55070 FOR I = 1 TO 5
55080 CIRCLE (X, y), R, C, , , I * .2: NEXT I
55090 IF VERT THEN RETURN
55100 CIRCLE (X, y), R, C, , , 1.3
55101 CIRCLE (X, y), R, C, , , 2.8
55110 LOCATE 13, 1
55120 CIRCLE (X, y), R, C, , , 3.6
55130 CIRCLE (X, y), R, C, , , 9.8
55140 IF VERT GOTO 55060
55150 RETURN
55160 SCREEN 1: COLOR 0, 1: KEY OFF: VERT = 0
55170 X = 160: y = 100: C = 1: R = 50: GOSUB 55050
55200 LINE (158, 30)-(158, 169), 1
55225 LINE (30, 100)-(289, 100), 1
55245 LINE (30, 169)-(289, 30), 1, B
55520 CIRCLE (X, y), R, C, , , 3.6
55610 LOCATE 2, 7: PRINT "Posiciones relativas de los electrones"
55615 LOCATE 23, 5: PRINT "presiona ENTER para continuar"
55750 Z$ = INKEY$: IF Z$ = "" THEN 55750
55835 LINE (110, 100)-(158, 100), 5
55855 LINE (158, 50)-(158, 149), 5
55865 LINE (110, 100)-(158, 149), 5
55875 LINE (158, 50)-(110, 100), 5
55900 LOCATE 10, 1
55910 PRINT "El radio"
55912 LOCATE 12, 1

```

```
55915 PRINT " de la"
55920 LOCATE 14, 1
55921 LINE (6, 105)-(14, 100), 5
55922 LINE (7, 105)-(15, 100), 5
55925 PRINT " orbita"
55930 LOCATE 16, 1
55935 PRINT " es r"
55937 LOCATE 23, 5
55938 PRINT "presiona ENTER para continuar"
55940 IF INKEY$ = "" THEN 55940
55950 LOCATE 12, 18
55955 PRINT "r"
55960 LOCATE 10, 21
55965 PRINT "r"
55970 LOCATE 16, 21
55975 PRINT "r"
55985 IF INKEY$ = "" GOTO 55985
56000 LOCATE 6, 27
56010 PRINT "La hipotenusa"
56100 LOCATE 8, 28
56112 LINE (275, 56)-(279, 52), 5
56113 LINE (274, 56)-(278, 52), 5
56115 PRINT "del triángulo"
56120 LOCATE 10, 30
56125 PRINT "es"
56126 IF INKEY$ = "" GOTO 56126
56127 LOCATE 10, 33
56128 PRINT " 2 r"
56129 LINE (258, 80)-(262, 70): LINE (262, 70)-(273, 70): LINE (266,
76)-(258, 80)
56130 LOCATE 8, 16
56135 PRINT "2 r"
56138 LINE (114, 64)-(118, 54): LINE (118, 54)-(129, 54): LINE (112,
80)-(114, 64)
56200 IF INKEY$ = "" THEN 56200
56201 CLS
56210 CIRCLE (158, 50), 48, 5
56211 CIRCLE (158, 50), 3, 5
56225 LINE (70, 50)-(240, 50), 1
```

56235 LINE (110, 50)-(207, 50), 5
56240 LINE (158, 7)-(158, 92), 5
56245 LINE (110, 49)-(158, 92), 5
56246 LINE (110, 49)-(158, 92), 5
56255 LINE (158, 7)-(110, 50), 5
56256 LINE (158, 7)-(205, 43), 1
56257 LINE (158, 15)-(204, 50), 1
56258 LINE (158, 23)-(202, 60), 1
56259 LINE (158, 30)-(199, 71), 1
56260 LINE (158, 40)-(195, 75), 1
56262 LINE (158, 52)-(183, 83), 1
56263 LINE (158, 62)-(172, 88), 1
56264 LINE (158, 75)-(163, 89), 1
56265 LINE (170, 11)-(204, 37), 1
56266 LINE (110, 100)-(150, 100), 1
56267 LINE (170, 100)-(204, 100), 1
56270 LINE (205, 100)-(201, 95), 1
56272 LINE (205, 100)-(201, 105), 1
56274 LINE (110, 100)-(114, 95), 1
56276 LINE (110, 100)-(114, 105), 1
56280 LOCATE 13, 20
56282 PRINT "2r"
56292 LINE (108, 20)-(112, 12): LINE (112, 12)-(123, 12): LINE (106,
18)-(108, 22)
56300 LOCATE 6, 18
56305 PRINT "r"
56310 LOCATE 6, 23
56315 PRINT "r"
56320 LOCATE 3, 15
56322 PRINT "2 r"
56325 LOCATE 25, 5
56326 PRINT "presiona ENTER para continuar"
56327 Z\$ = INKEY\$: IF Z\$ = "" THEN 56327
56330 LOCATE 15, 5
56335 PRINT "La distancia promedio entre"
56340 LOCATE 16, 7
56345 PRINT "los electrones es"
56347 Z\$ = INKEY\$: IF Z\$ = "" THEN 56347
56350 LOCATE 18, 22

```
56353 LINE (200, 140)-(204, 130): LINE (204, 130)-(216, 130): LINE
(198, 136)-(200, 142)
56355 PRINT "2 +"
56356 LOCATE 18, 27
56357 PRINT "2"
56360 LOCATE 19, 8: PRINT "< r - r"
56362 LINE (122, 140)-(122, 155)
56363 LINE (65, 140)-(65, 155)
56365 LOCATE 19, 17: PRINT "> = _____ r = K r"
56370 LOCATE 20, 11
56375 PRINT "2 1"
56380 LOCATE 21, 24
56385 PRINT "2"
56387 IF INKEY$ = "" GOTO 56387
56390 LOCATE 23, 13
56395 PRINT "donde K=1.707107"
56397 Z$ = INKEY$: IF Z$ = "" THEN 56397
57330 SCREEN 2: SCREEN 0: COLOR 3, 0
57340 LOCATE 4, 10
57350 PRINT "En el modelo propuesto:"
57360 LOCATE 8, 14
57370 PRINT "Z   representa el NUMERO ATOMICO del elemento"
57380 LOCATE 10, 14
57390 PRINT "nx  representa el NIVEL o la ORBITA del elemento"
57400 LOCATE 12, 14
57410 PRINT "Nx  representa el NUMERO DE ELECTRONES en la
órbita nx"
57420 LOCATE 14, 14
57430 PRINT "Zx   representa el NUMERO DE ELECTRONES
EXTERNOS"
57440 LOCATE 15, 14
57450 PRINT "   a partir de la órbita nx"
57460 LOCATE 13, 15
57470 PRINT
57475 LOCATE 20, 25
57476 PRINT "Presiona ENTER para continuar"
57480 IF INKEY$ = "" THEN 57480
57490 CLS
57500 LOCATE 6, 15
```

```

57510 PRINT "La ENERGIA correspondiente al nivel nx, expresada
en Hartrees, es"
57520 LOCATE 10, 32
57533 PRINT "( 2 Nx Zx - Nx (Nx-1) β )2"
57535 LOCATE 11, 22
57536 PRINT "Ex = - _____"
57537 LOCATE 12, 40
57538 PRINT "8 Nx (nx)2"
57540 LOCATE 16, 50
57550 PRINT "2"
57551 LOCATE 17, 16
57552 PRINT "donde la constante β = 1/K = _____ =
0.585786"
57555 LOCATE 18, 43
57556 PRINT " 2 + (2)1/2 "
57557 LOCATE 23, 25
57558 PRINT "presiona ENTER para continuar"
57559 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 57559
57600 CLS
57610 LOCATE 4, 10
57620 PRINT "Para determinar la ENERGIA TOTAL del átomo con n
órbitas deber n": LOCATE 6, 13: PRINT "sumarse las energías con
las que contribuye cada nivel nx:"
57630 LOCATE 12, 25
57640 PRINT " n n ( 2 Nx Zx - Nx (Nx-1) β )2"
57650 LOCATE 13, 12
57660 PRINT " E total = ∑ Ex = - ∑ _____"
57670 LOCATE 14, 25
57680 PRINT "x=1 x=1 8 Nx (nx)2"
57690 LOCATE 23, 25
57700 PRINT "presiona ENTER para continuar"
57800 IF INKEY$ = "" THEN GOTO 230

```

ANEXO B Propiedades atómicas de los elementos

Energías totales en el estado base, radios atómicos, primeros potenciales de ionización y afinidades electrónicas de los 109 elementos

| ELEMENTO | Z | Radio atómico (ro) | Energía Total (Hartree) | Primer Potencial de Ionización (Hartree) | Afinidad Electrónica (Hartree) |
|-----------|-------|--------------------|-------------------------|--|--------------------------------|
| Hidrógeno | 1 H | 1.000 | -0.500 | 0.5 | 0.028 |
| Helio | 2 He | 0.940 | -2.914 | 0.9 | ---- |
| Litio | 3 Li | 3.752 | -7.453 | 0.2 | 0.227 |
| Berilio | 4 Be | 2.609 | -14.471 | 0.34 | ---- |
| Boro | 5 B | 2.255 | -24.343 | 0.3 | 0.011 |
| Carbono | 6 C | 1.719 | -37.442 | 0.41 | 0.046 |
| Nitrógeno | 7 N | 1.409 | -54.146 | 0.53 | ---- |
| Oxígeno | 8 O | 1.203 | -74.828 | 0.5 | 0.054 |
| Flúor | 9 F | 1.050 | -99.863 | 0.64 | 0.125 |
| Neón | 10 Ne | 0.934 | -129.627 | 0.79 | ---- |
| Sodio | 11 Na | 4.021 | -162.997 | 0.19 | 0.020 |
| Magnesio | 12 Mg | 3.122 | -200.579 | 0.28 | ---- |
| Aluminio | 13 Al | 3.434 | -242.540 | 0.22 | 0.016 |
| Silicio | 14 Si | 2.707 | -289.047 | 0.3 | 0.051 |
| Fósforo | 15 P | 2.282 | -340.267 | 0.385 | 0.027 |
| Azufre | 16 S | 1.986 | -396.367 | 0.38 | 0.076 |
| Cloro | 17 Cl | 1.766 | -457.512 | 0.48 | 0.133 |
| Argón | 18 Ar | 1.752 | -523.870 | 0.58 | ---- |
| Potasio | 19 K | 4.939 | -594.948 | 0.16 | 0.018 |
| Calcio | 20 Ca | 3.970 | -671.035 | 0.22 | 0.038 |
| Escandio | 21 Sc | 3.706 | -753.731 | 0.24 | 0.007 |
| Titanio | 22 Ti | 3.507 | -842.287 | 0.25 | 0.007 |
| Vanadio | 23 V | 3.346 | -936.871 | 0.25 | 0.019 |
| Cromo | 24 Cr | 3.559 | -1039.453 | 0.25 | 0.245 |
| Manganeso | 25 Mn | 3.085 | -1144.785 | 0.27 | ---- |
| Fierro | 26 Fe | 2.977 | -1258.449 | 0.29 | 0.005 |
| Cobalto | 27 Co | 2.879 | -1378.807 | 0.29 | 0.024 |
| Níquel | 28 Ni | 2.791 | -1506.025 | 0.28 | 0.042 |
| Cobre | 29 Cu | 3.006 | -1643.202 | 0.28 | 0.086 |
| Zinc | 30 Zn | 2.633 | -1781.709 | 0.345 | ---- |
| Galio | 31 Ga | 3.361 | -1926.428 | 0.22 | 0.011 |
| Germanio | 32 Ge | 2.780 | -2077.455 | 0.29 | 0.045 |
| Arsénico | 33 As | 2.479 | -2234.883 | 0.36 | 0.030 |

| ELEMENTO | Z | | Radio atómico (r ₀) | Energía Total (Hartree) | Primer Potencial de Ionización (Hartree) | Afinidad Electrónica (Hartree) |
|-------------|----|----|---------------------------------|-------------------------|--|--------------------------------|
| Selenio | 34 | Se | 2.223 | -2398.805 | 0.36 | 0.074 |
| Bromo | 35 | Br | 2.030 | -2569.316 | 0.43 | 0.124 |
| Kriptón | 36 | Kr | 1.877 | -2746.509 | 0.51 | ---- |
| Rubidio | 37 | Rb | 5.197 | -2930.109 | 0.15 | 0.018 |
| Estroncio | 38 | Sr | 4.266 | -3120.285 | 0.21 | 0.004 |
| Itrio | 39 | Y | 3.925 | -3317.918 | 0.23 | 0.011 |
| Zirconio | 40 | Zr | 3.699 | -3522.598 | 0.25 | 0.016 |
| Niobio | 41 | Nb | 3.805 | -3735.310 | 0.25 | 0.033 |
| Molibdeno | 42 | Mo | 3.661 | -3954.474 | 0.26 | 0.064 |
| Tecnecio | 43 | Tc | 3.267 | -4180.971 | 0.27 | 0.020 |
| Rutenio | 44 | Ru | 3.430 | -4414.895 | 0.27 | 0.039 |
| Rodio | 45 | Rh | 3.339 | -4656.340 | 0.275 | 0.042 |
| Paladio | 46 | Pa | 1.501 | -4906.579 | 0.31 | 0.020 |
| Plata | 47 | Ag | 3.180 | -5162.166 | 0.28 | 0.048 |
| Cadmio | 48 | Cd | 2.845 | -5424.953 | 0.33 | ---- |
| Indio | 49 | In | 3.582 | -5695.003 | 0.21 | 0.011 |
| Estaño | 50 | Sn | 3.061 | -5972.374 | 0.27 | 0.041 |
| Antimonio | 51 | Sb | 2.872 | -6257.126 | 0.32 | 0.039 |
| Teluro | 52 | Te | 2.610 | -6549.016 | 0.33 | 0.072 |
| Iodo | 53 | I | 2.413 | -6849.016 | 0.385 | 0.112 |
| Xenón | 54 | Xe | 2.253 | -7156.274 | 0.45 | ---- |
| Cesio | 55 | Cs | 5.664 | -7465.113 | 0.125 | 0.017 |
| Bario | 56 | Ba | 4.715 | -7793.059 | 0.19 | 0.006 |
| Lantano | 57 | La | 4.368 | -8123.253 | 0.205 | 0.018 |
| Cerio | 58 | Ce | 4.302 | -8474.838 | 0.2 | ---- |
| Praseodimio | 59 | Pr | 4.239 | -8828.856 | 0.2 | ---- |
| Neodimio | 60 | Nd | 4.420 | -9191.755 | 0.2 | ---- |
| Prometio | 61 | Pm | 4.360 | -9563.625 | 0.2 | ---- |
| Samario | 62 | Sm | 4.304 | -9944.561 | 0.21 | ---- |
| Europio | 63 | Eu | 4.359 | -10334.660 | 0.21 | ---- |
| Gadolinio | 64 | Gd | 4.053 | -10724.880 | 0.225 | ---- |
| Terbio | 65 | Tb | 4.253 | -11142.700 | 0.215 | ---- |
| Disprosio | 66 | Dy | 4.203 | -11560.840 | 0.22 | ---- |
| Holmio | 67 | Ho | 4.049 | -11988.520 | 0.22 | ---- |
| Erbio | 68 | Er | 4.002 | -12425.820 | 0.22 | ---- |
| Tulio | 69 | Tm | 3.582 | -12872.840 | 0.23 | ---- |
| Iterbio | 70 | Yb | 3.911 | -13329.680 | 0.23 | ---- |
| Lutecio | 71 | Lu | 3.620 | -13784.250 | 0.2 | ---- |

| ELEMENTO | Z | | Radio atómico (r ₀) | Energía Total (Hartree) | Primer Potencial de Ionización (Hartree) | Afinidad Electrónica (Hartree) |
|-------------|-----|-----|---------------------------------|-------------------------|--|--------------------------------|
| Hafnio | 72 | Hf | 3.427 | -14247.500 | 0.26 | ---- |
| Tantalio | 73 | Ta | 3.278 | -14719.470 | 0.29 | 0.012 |
| Tungsteno | 74 | W | 3.154 | -15200.230 | 0.29 | 0.300 |
| Renio | 75 | Re | 3.041 | -15689.340 | 0.3 | 0.006 |
| Osmio | 76 | Os | 2.942 | -16188.370 | 0.32 | 0.040 |
| Iridio | 77 | Ir | 2.854 | -16697.410 | 0.335 | 0.058 |
| Platino | 78 | Pt | 2.918 | -17213.340 | 0.33 | 0.078 |
| Oro | 79 | Au | 2.843 | -17739.030 | 0.34 | 0.085 |
| Mercurio | 80 | Hg | 2.636 | -18272.750 | 0.38 | ---- |
| Talio | 81 | Tl | 3.394 | -18815.290 | 0.225 | 0.007 |
| Plomo | 82 | Pb | 2.977 | -19366.670 | 0.27 | 0.013 |
| Bismuto | 83 | Bi | 3.166 | -19926.960 | 0.27 | 0.035 |
| Polonio | 84 | Po | 2.869 | -20496.190 | 0.31 | 0.070 |
| Astato | 85 | At | 2.654 | -21074.400 | 0.35 | 0.103 |
| Radón | 86 | Rn | 2.486 | -21661.630 | 0.395 | ---- |
| Francio | 87 | Fr | 5.530 | -22257.770 | 0.15 | 0.017 |
| Radio | 88 | Ra | 4.667 | -22862.880 | 0.195 | ---- |
| Actinio | 89 | Ac | 4.278 | -23477.360 | 0.25 | ---- |
| Torio | 90 | Th | 4.014 | -24101.820 | 0.255 | ---- |
| Protactinio | 91 | Pa | 4.106 | -24742.800 | ---- | ---- |
| Uranio | 92 | U | 4.036 | -25390.260 | 0.25 | ---- |
| Neptunio | 93 | Np | 3.971 | -26047.610 | 0.21 | ---- |
| Plutonio | 94 | Pu | 4.133 | -26714.920 | 0.22 | ---- |
| Americio | 95 | Am | 4.075 | -27392.250 | ---- | ---- |
| Curio | 96 | Cm | 3.798 | -28079.650 | ---- | ---- |
| Berkelio | 97 | Bk | 3.743 | -28777.200 | ---- | ---- |
| Californio | 98 | Cf | 3.916 | -29484.950 | ---- | ---- |
| Einsteinio | 99 | Es | 3.868 | -30202.950 | ---- | ---- |
| Fermio | 100 | Fm | 3.587 | -30931.270 | ---- | ---- |
| Mendelevio | 101 | Md | 3.772 | -31669.980 | ---- | ---- |
| Nobelio | 102 | No | 3.726 | -32419.110 | ---- | ---- |
| Lawrencio | 103 | Lw | 3.438 | -33178.760 | ---- | ---- |
| Kurchatovio | 104 | Ku | 3.249 | -33940.820 | ---- | ---- |
| Hahnio | 105 | Ha | 3.099 | -34712.670 | ---- | ---- |
| Unihexio | 106 | Unh | 2.973 | -35494.350 | ---- | ---- |
| Uniseptio | 107 | Uns | 2.847 | -36285.900 | ---- | ---- |
| Unioctio | 108 | Uno | 2.737 | -37087.360 | ---- | ---- |
| Unilenio | 109 | Une | 2.639 | -37898.780 | ---- | ---- |

ANEXO C

Configuraciones electrónicas de los 109 elementos

Z Configuración electrónica

| | |
|----|---|
| 1 | $1s^1 = 1s(1)$ |
| 2 | $1s^2 = 1s(2)$ |
| 3 | $1s^2 2s^1 = [\text{He}] 2s(1)$ |
| 4 | $1s^2 2s^2 = [\text{He}] 2s(2)$ |
| 5 | $1s^2 2s^2 2p^1 = [\text{He}] 2s(2) 2p(1)$ |
| 6 | $1s^2 2s^2 2p^2 = [\text{He}] 2s(2) 2p(2)$ |
| 7 | $1s^2 2s^2 2p^3 = [\text{He}] 2s(2) 2p(3)$ |
| 8 | $1s^2 2s^2 2p^4 = [\text{He}] 2s(2) 2p(4)$ |
| 9 | $1s^2 2s^2 2p^5 = [\text{He}] 2s(2) 2p(5)$ |
| 10 | $1s^2 2s^2 2p^6 = [\text{Ne}]$ |
| 11 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 = [\text{Ne}] 3s(1)$ |
| 12 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 = [\text{Ne}] 3s(2)$ |
| 13 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1 = [\text{Ne}] 3s(2) 3p(1)$ |
| 14 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 = [\text{Ne}] 3s(2) 3p(2)$ |
| 15 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3 = [\text{Ne}] 3s(2) 3p(3)$ |
| 16 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4 = [\text{Ne}] 3s(2) 3p(4)$ |
| 17 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 = [\text{Ne}] 3s(2) 3p(5)$ |
| 18 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 = [\text{Ar}]$ |
| 19 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 = [\text{Ar}] 4s(1)$ |
| 20 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 = [\text{Ar}] 4s(2)$ |
| 21 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 = [\text{Ar}] 3d(1) 4s(2)$ |
| 22 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2 = [\text{Ar}] 3d(2) 4s(2)$ |
| 23 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2 = [\text{Ar}] 3d(3) 4s(2)$ |
| 24 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1 = [\text{Ar}] 3d(5) 4s(1)$ |
| 25 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 = [\text{Ar}] 3d(5) 4s(2)$ |
| 26 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2 = [\text{Ar}] 3d(6) 4s(2)$ |
| 27 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2 = [\text{Ar}] 3d(7) 4s(2)$ |
| 28 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2 = [\text{Ar}] 3d(8) 4s(2)$ |
| 29 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 = [\text{Ar}] 3d(10) 4s(1)$ |
| 30 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 = [\text{Ar}] 3d(10) 4s(2)$ |
| 31 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1 = [\text{Ar}] 3d(10) 4s(2) 4p(1)$ |
| 32 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2 = [\text{Ar}] 3d(10) 4s(2) 4p(2)$ |
| 33 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3 = [\text{Ar}] 3d(10) 4s(2) 4p(3)$ |

Z Configuración electrónica

- 34 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^4 = [\text{Ar}] 3d(10) 4s(2) 4p(4)$
 35 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5 = [\text{Ar}] 3d(10) 4s(2) 4p(5)$
 36 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 = [\text{Kr}]$
 37 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^1 = [\text{Kr}] 5s(1)$
 38 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^2 = [\text{Kr}] 5s(2)$
 39 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^1 5s^2 = [\text{Kr}] 4d(1) 5s(2)$
 40 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^2 5s^2 = [\text{Kr}] 4d(2) 5s(2)$
 41 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^4 5s^1 = [\text{Kr}] 4d(4) 5s(1)$
 42 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^5 5s^1 = [\text{Kr}] 4d(5) 5s(1)$
 43 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^5 5s^2 = [\text{Kr}] 4d(5) 5s(2)$
 44 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^7 5s^1 = [\text{Kr}] 4d(7) 5s(1)$
 45 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^8 5s^1 = [\text{Kr}] 4d(8) 5s(1)$
 46 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} = [\text{Kr}] 4d(10)$
 47 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^1 = [\text{Kr}] 4d(10) 5s(1)$
 48 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 = [\text{Kr}] 4d(10) 5s(2)$
 49 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^1$
 $= [\text{Kr}] 4d(10) 5s(2) 5p(1)$
 50 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^2$
 $= [\text{Kr}] 4d(10) 5s(2) 5p(2)$
 51 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^3$
 $= [\text{Kr}] 4d(10) 5s(2) 5p(3)$
 52 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^4$
 $= [\text{Kr}] 4d(10) 5s(2) 5p(4)$
 53 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^5$
 $= [\text{Kr}] 4d(10) 5s(2) 5p(5)$
 54 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 = [\text{Xe}]$
 55 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 6s^1 = [\text{Xe}] 6s(1)$
 56 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 6s^2 = [\text{Xe}] 6s(2)$
 57 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 5d(1) 6s(2)$
 58 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^1 5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(1) 5d(1) 6s(2)$
 59 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^3 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(3) 6s(2)$
 60 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^4 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(4) 6s(2)$

Z Configuración electrónica

- 61 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^5 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(5) 6s(2)$
- 62 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^6 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(6) 6s(2)$
- 63 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^7 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(7) 6s(2)$
- 64 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^7 5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(7) 5d(1) 6s(2)$
- 65 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^9 4f^9 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= 4f(9) 6s(2)$
- 66 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{10} 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(10) 5s(2) 5p(6) 6s(2)$
- 67 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{11} 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(11) 6s(2)$
- 68 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{12} 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(12) 6s(2)$
- 69 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{13} 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(13) 6s(2)$
- 70 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(14) 6s(2)$
- 71 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(14) 5d(1) 6s(2)$
- 72 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^2 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(14) 5d(2) 6s(2)$
- 73 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^3 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(14) 5d(3) 6s(2)$
- 74 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^4 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(14) 5d(4) 6s(2)$
- 75 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^5 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(14) 5d(5) 6s(2)$
- 76 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^6 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(14) 5d(6) 6s(2)$
- 77 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^7 6s^2$
 $= [\text{Xe}] 4f(14) 5d(7) 6s(2)$
- 78 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^9 6s^1$
 $= [\text{Xe}] 4f(14) 5d(9) 6s(1)$

Z Configuración electrónica

| | |
|----|---|
| 79 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^1$ = [Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(1) |
| 80 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$ = [Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(2) |
| 81 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$ $6p^1$ = [Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(2) 6p(1) |
| 82 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$ $6p^2$ = [Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(2) 6p(2) |
| 83 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$ $6p^3$ = [Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(2) 6p(3) |
| 84 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$ $6p^4$ = [Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(2) 6p(4) |
| 85 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$ $6p^5$ = [Xe] 4f(14) 5d(10) 6s(2) 6p(5) |
| 86 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$ $6p^6$ = [Rn] |
| 87 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$ $6p^6 7s^1$ = [Rn] 7s(1) |
| 88 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$ $6p^6 7s^2$ = [Rn] 7s(2) |
| 89 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$ $6p^6 6d^1 7s^2$ = [Rn] 6d(1) 7s(2) |
| 90 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$ $6p^6 6d^2 7s^2$ = [Rn] 6d(2) 7s(2) |
| 91 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^2$ $6s^2 6p^6 6d^1 7s^2$ = [Rn] 5f(2) 6d(1) 7s(2) |
| 92 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^3$ $6s^2 6p^6 6d^1 7s^2$ = [Rn] 5f(3) 6d(1) 7s(2) |
| 93 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^4$ $6s^2 6p^6 6d^1 7s^2$ = [Rn] 5f(4) 6d(1) 7s(2) |
| 94 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^6$ $6s^2 6p^6 7s^2$ = [Rn] 5f(6) 7s(2) |
| 95 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^7$ $6s^2 6p^6 7s^2$ = [Rn] 5f(7) 7s(2) |
| 96 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^7$ $6s^2 6p^6 6d^1 7s^2$ = [Rn] 5f(7) 6d(1) 7s(2) |

- 97 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^9 6s^2 6p^6 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(9) 7s(2)$
- 98 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{10} 6s^2 6p^6 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(10) 7s(2)$
- 99 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{11} 6s^2 6p^6 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(11) 7s(2)$
- 100 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{12} 6s^2 6p^6 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(12) 7s(2)$
- 101 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{13} 6s^2 6p^6 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(13) 7s(2)$
- 102 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 6s^2 6p^6 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(14) 7s(2)$
- 103 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 6s^2 6p^6 6d^1 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(14) 6d(1) 7s(2)$
- 104 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 6s^2 6p^6 6d^2 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(14) 6d(2) 7s(2)$
- 105 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 6s^2 6p^6 6d^3 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(14) 6d(3) 7s(2)$
- 106 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 6s^2 6p^6 6d^4 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(14) 6d(4) 7s(2)$
- 107 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 6s^2 6p^6 6d^5 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(14) 6d(5) 7s(2)$
- 108 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 6s^2 6p^6 6d^6 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(14) 6d(6) 7s(2)$
- 109 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 6s^2 6p^6 6d^7 7s^2 = [\text{Rn}] 5f(14) 6d(7) 7s(2)$

ANEXO D

Cálculo de las energías por nivel y total para elementos
de número atómico $Z=1$ a $Z=109$ de acuerdo al modelo de R. Gómez

| Simbolo | Elemento | Z | n_x | N_x | Z_x | E_x (Hartree) |
|---------|-----------|----|-------|-------|-------|-----------------------|
| H | Hidrógeno | 1 | 1 | 1 | 1 | -0.5 |
| | | | | | | Ettotal -0.5 |
| He | Helio | 2 | 1 | 2 | 2 | -2.914 |
| | | | | | | Ettotal -2.914 |
| Li | Litio | 3 | 1 | 2 | 3 | -7.328 |
| | | 3 | 2 | 1 | 1 | -0.125 |
| | | | | | | Ettotal -7.453 |
| Be | Berilio | 4 | 1 | 2 | 4 | -13.74 |
| | | 4 | 2 | 2 | 2 | -0.729 |
| | | | | | | Ettotal -14.47 |
| B | Boro | 5 | 1 | 2 | 5 | -22.16 |
| | | 5 | 2 | 3 | 3 | -2.186 |
| | | | | | | Ettotal -24.34 |
| C | Carbono | 6 | 1 | 2 | 6 | -32.57 |
| | | 6 | 2 | 4 | 4 | -4.871 |
| | | | | | | Ettotal -37.44 |
| N | Nitrógeno | 7 | 1 | 2 | 7 | -44.99 |
| | | 7 | 2 | 5 | 5 | -9.161 |
| | | | | | | Ettotal -54.15 |
| O | Oxígeno | 8 | 1 | 2 | 8 | -59.4 |
| | | 8 | 2 | 6 | 6 | -15.43 |
| | | | | | | Ettotal -74.83 |
| F | Flúor | 9 | 1 | 2 | 9 | -75.81 |
| | | 9 | 2 | 7 | 7 | -24.05 |
| | | | | | | Ettotal -99.86 |
| Ne | Neón | 10 | 1 | 2 | 10 | -94.23 |
| | | 10 | 2 | 8 | 8 | -35.4 |
| | | | | | | Ettotal -129.6 |
| Na | Sodio | 11 | 1 | 2 | 11 | -114.6 |
| | | 11 | 2 | 8 | 9 | -48.3 |
| | | 11 | 3 | 1 | 1 | -0.056 |
| | | | | | | Ettotal -163 |

| Símbolo | Elemento | Z | nx | Nx | Zx | Ex (Hartree) |
|---------|----------|----|----|----|----|-----------------------|
| Mg | Magnesio | 12 | 1 | 2 | 12 | -137.1 |
| | | 12 | 2 | 8 | 10 | -63.2 |
| | | 12 | 3 | 2 | 2 | -0.324 |
| | | | | | | Ettotal -200.6 |
| Al | Aluminio | 13 | 1 | 2 | 13 | -161.5 |
| | | 13 | 2 | 8 | 11 | -80.1 |
| | | 13 | 3 | 3 | 3 | -0.971 |
| | | | | | | Ettotal -242.5 |
| Si | Silicio | 14 | 1 | 2 | 14 | -187.9 |
| | | 14 | 2 | 8 | 12 | -99 |
| | | 14 | 3 | 4 | 4 | -2.165 |
| | | | | | | Ettotal -289 |
| P | Fósforo | 15 | 1 | 2 | 15 | -216.3 |
| | | 15 | 2 | 8 | 13 | -119.9 |
| | | 15 | 3 | 5 | 5 | -4.071 |
| | | | | | | Ettotal -340.3 |
| S | Azufre | 16 | 1 | 2 | 16 | -246.7 |
| | | 16 | 2 | 8 | 14 | -142.8 |
| | | 16 | 3 | 6 | 6 | -6.857 |
| | | | | | | Ettotal -396.4 |
| Cl | Cloro | 17 | 1 | 2 | 17 | -279.1 |
| | | 17 | 2 | 8 | 15 | -167.7 |
| | | 17 | 3 | 7 | 7 | -10.69 |
| | | | | | | Ettotal -457.5 |
| Ar | Argón | 18 | 1 | 2 | 18 | -313.5 |
| | | 18 | 2 | 8 | 16 | -194.6 |
| | | 18 | 3 | 8 | 8 | -15.73 |
| | | | | | | Ettotal -523.9 |
| K | Potasio | 19 | 1 | 2 | 19 | -350 |
| | | 19 | 2 | 8 | 17 | -223.5 |
| | | 19 | 3 | 8 | 9 | -21.47 |
| | | 19 | 4 | 1 | 1 | -0.031 |
| | | | | | | Ettotal -594.9 |
| Ca | Calcio | 20 | 1 | 2 | 20 | -388.4 |
| | | 20 | 2 | 8 | 18 | -254.4 |
| | | 20 | 3 | 8 | 10 | -28.09 |
| | | 20 | 4 | 2 | 2 | -0.182 |
| | | | | | | Ettotal -671 |

| Símbolo | Elemento | Z | nx | Nx | Zx | Ex (Hartree) | |
|---------|-----------|----|----|----|----|-----------------|--------|
| Sc | Escandio | 21 | 1 | 2 | 21 | -428.8 | |
| | | 21 | 2 | 8 | 19 | -287.3 | |
| | | 21 | 3 | 9 | 11 | -37.47 | |
| | | 21 | 4 | 2 | 2 | -0.182 | |
| | | | | | | Etotal | -753.7 |
| Ti | Titanio | 22 | 1 | 2 | 22 | -471.2 | |
| | | 22 | 2 | 8 | 20 | -322.2 | |
| | | 22 | 3 | 10 | 12 | -48.71 | |
| | | 22 | 4 | 2 | 2 | -0.182 | |
| | | | | | | Etotal | -842.3 |
| V | Vanadio | 23 | 1 | 2 | 23 | -515.6 | |
| | | 23 | 2 | 8 | 21 | -359.1 | |
| | | 23 | 3 | 11 | 13 | -61.98 | |
| | | 23 | 4 | 2 | 2 | -0.182 | |
| | | | | | | Etotal | -936.9 |
| Cr | Cromo | 24 | 1 | 2 | 24 | -562 | |
| | | 24 | 2 | 8 | 22 | -398 | |
| | | 24 | 3 | 13 | 14 | -79.4 | |
| | | 24 | 4 | 1 | 1 | -0.031 | |
| | | | | | | Etotal | -1039 |
| Mn | Manganeso | 25 | 1 | 2 | 25 | -610.4 | |
| | | 25 | 2 | 8 | 23 | -438.9 | |
| | | 25 | 3 | 13 | 15 | -95.27 | |
| | | 25 | 4 | 2 | 2 | -0.182 | |
| | | | | | | Etotal | -1145 |
| Fe | Fierro | 26 | 1 | 2 | 26 | -660.9 | |
| | | 26 | 2 | 8 | 24 | -481.8 | |
| | | 26 | 3 | 14 | 16 | -115.6 | |
| | | 26 | 4 | 2 | 2 | -0.182 | |
| | | | | | | Etotal | -1258 |
| Co | Cobalto | 27 | 1 | 2 | 27 | -713.3 | |
| | | 27 | 2 | 8 | 25 | -526.7 | |
| | | 27 | 3 | 15 | 17 | -138.7 | |
| | | 27 | 4 | 2 | 2 | -0.182 | |
| | | | | | | Etotal | -1379 |
| Ni | Níquel | 28 | 1 | 2 | 28 | -767.7 | |
| | | 28 | 2 | 8 | 26 | -573.6 | |
| | | 28 | 3 | 16 | 18 | -164.6 | |
| | | 28 | 4 | 2 | 2 | -0.182 | |
| | | | | | | Etotal | -1506 |

| Símbolo | Elemento | Z | nx | Nx | Zx | Ex (Hartree) | |
|---------|----------|----|----|----|----|-----------------|-------|
| Cu | Cobre | 29 | 1 | 2 | 29 | -824.1 | |
| | | 29 | 2 | 8 | 27 | -622.5 | |
| | | 29 | 3 | 18 | 19 | -196.6 | |
| | | 29 | 4 | 1 | 1 | -0.031 | |
| | | | | | | Etotal | -1643 |
| Zn | Zinc | 30 | 1 | 2 | 30 | -882.5 | |
| | | 30 | 2 | 8 | 28 | -673.4 | |
| | | 30 | 3 | 18 | 20 | -225.6 | |
| | | 30 | 4 | 2 | 2 | -0.182 | |
| | | | | | | Etotal | -1782 |
| Ga | Galio | 31 | 1 | 2 | 31 | -942.9 | |
| | | 31 | 2 | 8 | 29 | -726.3 | |
| | | 31 | 3 | 18 | 21 | -256.7 | |
| | | 31 | 4 | 3 | 3 | -0.546 | |
| | | | | | | Etotal | -1926 |
| Ge | Germanio | 32 | 1 | 2 | 32 | -1005 | |
| | | 32 | 2 | 8 | 30 | -781.2 | |
| | | 32 | 3 | 18 | 22 | -289.7 | |
| | | 32 | 4 | 4 | 4 | -1.218 | |
| | | | | | | Etotal | -2077 |
| As | Arsénico | 33 | 1 | 2 | 33 | -1070 | |
| | | 33 | 2 | 8 | 31 | -838.1 | |
| | | 33 | 3 | 18 | 23 | -324.7 | |
| | | 33 | 4 | 5 | 5 | -2.29 | |
| | | | | | | Etotal | -2235 |
| Se | Selenio | 34 | 1 | 2 | 34 | -1136 | |
| | | 34 | 2 | 8 | 32 | -897 | |
| | | 34 | 3 | 18 | 24 | -361.8 | |
| | | 34 | 4 | 6 | 6 | -3.857 | |
| | | | | | | Etotal | -2399 |
| Br | Bromo | 35 | 1 | 2 | 35 | -1205 | |
| | | 35 | 2 | 8 | 33 | -957.9 | |
| | | 35 | 3 | 18 | 25 | -400.8 | |
| | | 35 | 4 | 7 | 7 | -6.012 | |
| | | | | | | Etotal | -2569 |
| Kr | Kriptón | 36 | 1 | 2 | 36 | -1275 | |
| | | 36 | 2 | 8 | 34 | -1021 | |
| | | 36 | 3 | 18 | 26 | -441.9 | |
| | | 36 | 4 | 8 | 8 | -8.85 | |
| | | | | | | Etotal | -2747 |

| Simbolo | Elemento | Z | nx | Nx | Zx | Ex (Hartree) | |
|---------|-----------|----|----|----|----|-----------------|-------|
| Rb | Rubidio | 37 | 1 | 2 | 37 | -1347 | |
| | | 37 | 2 | 8 | 35 | -1086 | |
| | | 37 | 3 | 18 | 27 | -484.9 | |
| | | 37 | 4 | 8 | 9 | -12.07 | |
| | | 37 | 5 | 1 | 1 | -0.02 | |
| | | | | | | Etotal | -2930 |
| Sr | Estroncio | 38 | 1 | 2 | 38 | -1422 | |
| | | 38 | 2 | 8 | 36 | -1153 | |
| | | 38 | 3 | 18 | 28 | -530 | |
| | | 38 | 4 | 8 | 10 | -15.8 | |
| | | 38 | 5 | 2 | 2 | -0.117 | |
| | | | | | | Etotal | -3120 |
| Y | Itrio | 39 | 1 | 2 | 39 | -1498 | |
| | | 39 | 2 | 8 | 37 | -1221 | |
| | | 39 | 3 | 18 | 29 | -577 | |
| | | 39 | 4 | 9 | 11 | -21.08 | |
| | | 39 | 5 | 2 | 2 | -0.117 | |
| | | | | | | Etotal | -3318 |
| Zr | Zirconio | 40 | 1 | 2 | 40 | -1577 | |
| | | 40 | 2 | 8 | 38 | -1292 | |
| | | 40 | 3 | 18 | 30 | -626 | |
| | | 40 | 4 | 10 | 12 | -27.4 | |
| | | 40 | 5 | 2 | 2 | -0.117 | |
| | | | | | | Etotal | -3523 |
| Nb | Niobio | 41 | 1 | 2 | 41 | -1657 | |
| | | 41 | 2 | 8 | 39 | -1365 | |
| | | 41 | 3 | 18 | 31 | -677.1 | |
| | | 41 | 4 | 12 | 13 | -35.85 | |
| | | 41 | 5 | 1 | 1 | -0.02 | |
| | | | | | | Etotal | -3735 |
| Mo | Molibdeno | 42 | 1 | 2 | 42 | -1739 | |
| | | 42 | 2 | 8 | 40 | -1440 | |
| | | 42 | 3 | 18 | 32 | -730.1 | |
| | | 42 | 4 | 13 | 14 | -44.66 | |
| | | 42 | 5 | 1 | 1 | -0.02 | |
| | | | | | | Etotal | -3954 |

| Símbolo | Elemento | Z | n _x | N _x | Z _x | Ex (Hartree) | |
|---------|----------|----|----------------|----------------|----------------|-----------------|-------|
| Tc | Tecnecio | 43 | 1 | 2 | 43 | -1824 | |
| | | 43 | 2 | 8 | 41 | -1517 | |
| | | 43 | 3 | 18 | 33 | -785.2 | |
| | | 43 | 4 | 13 | 15 | -53.59 | |
| | | 43 | 5 | 2 | 2 | -0.117 | |
| | | | | | | Etotal | -4180 |
| Ru | Rutenio | 44 | 1 | 2 | 44 | -1910 | |
| | | 44 | 2 | 8 | 42 | -1596 | |
| | | 44 | 3 | 18 | 34 | -842.2 | |
| | | 44 | 4 | 15 | 16 | -66.37 | |
| | | 44 | 5 | 1 | 1 | -0.02 | |
| | | | | | | Etotal | -4415 |
| Rh | Rodio | 45 | 1 | 2 | 45 | -1999 | |
| | | 45 | 2 | 8 | 43 | -1677 | |
| | | 45 | 3 | 18 | 35 | -901.2 | |
| | | 45 | 4 | 16 | 17 | -79.46 | |
| | | 45 | 5 | 1 | 1 | -0.02 | |
| | | | | | | Etotal | -4656 |
| Pd | Paladio | 46 | 1 | 2 | 46 | -2089 | |
| | | 46 | 2 | 8 | 44 | -1760 | |
| | | 46 | 3 | 18 | 36 | -962.3 | |
| | | 46 | 4 | 18 | 18 | -95.37 | |
| | | | | | | Etotal | -4907 |
| Ag | Plata | 47 | 1 | 2 | 47 | -2182 | |
| | | 47 | 2 | 8 | 45 | -1845 | |
| | | 47 | 3 | 18 | 37 | -1025 | |
| | | 47 | 4 | 18 | 19 | -110.6 | |
| | | 47 | 5 | 1 | 1 | -0.02 | |
| | | | | | | Etotal | -5162 |
| Cd | Cadmio | 48 | 1 | 2 | 48 | -2276 | |
| | | 48 | 2 | 8 | 46 | -1932 | |
| | | 48 | 3 | 18 | 38 | -1090 | |
| | | 48 | 4 | 18 | 20 | -126.9 | |
| | | 48 | 5 | 2 | 2 | -0.117 | |
| | | | | | | Etotal | -5425 |
| In | Indio | 49 | 1 | 2 | 49 | -2372 | |
| | | 49 | 2 | 8 | 47 | -2020 | |
| | | 49 | 3 | 18 | 39 | -1157 | |
| | | 49 | 4 | 18 | 21 | -144.4 | |
| | | 49 | 5 | 3 | 3 | -0.35 | |
| | | | | | | Etotal | -5695 |

| Símbolo | Elemento | Z | nx | Nx | Zx | Ex (Hartree) | |
|---------|-----------|----|----|----|----|-----------------|-------|
| Sn | Estaño | 50 | 1 | 2 | 50 | -2471 | |
| | | 50 | 2 | 8 | 48 | -2111 | |
| | | 50 | 3 | 18 | 40 | -1226 | |
| | | 50 | 4 | 18 | 22 | -163 | |
| | | 50 | 5 | 4 | 4 | -0.779 | |
| | | | | | | Etotal | -5972 |
| Sb | Antimonio | 51 | 1 | 2 | 51 | -2571 | |
| | | 51 | 2 | 8 | 49 | -2204 | |
| | | 51 | 3 | 18 | 41 | -1297 | |
| | | 51 | 4 | 18 | 23 | -182.7 | |
| | | 51 | 5 | 5 | 5 | -1.466 | |
| | | | | | | Etotal | -6257 |
| Te | Teluro | 52 | 1 | 2 | 52 | -2674 | |
| | | 52 | 2 | 8 | 50 | -2299 | |
| | | 52 | 3 | 18 | 42 | -1371 | |
| | | 52 | 4 | 18 | 24 | -203.5 | |
| | | 52 | 5 | 6 | 6 | -2.469 | |
| | | | | | | Etotal | -6549 |
| I | Iodo | 53 | 1 | 2 | 53 | -2778 | |
| | | 53 | 2 | 8 | 51 | -2396 | |
| | | 53 | 3 | 18 | 43 | -1446 | |
| | | 53 | 4 | 18 | 25 | -225.5 | |
| | | 53 | 5 | 7 | 7 | -3.848 | |
| | | | | | | Etotal | -6849 |
| Xe | Xenón | 54 | 1 | 2 | 54 | -2884 | |
| | | 54 | 2 | 8 | 52 | -2495 | |
| | | 54 | 3 | 18 | 44 | -1523 | |
| | | 54 | 4 | 18 | 26 | -248.6 | |
| | | 54 | 5 | 8 | 8 | -5.664 | |
| | | | | | | Etotal | -7156 |
| Cs | Cesio | 55 | 1 | 2 | 55 | -2993 | |
| | | 55 | 2 | 8 | 53 | -2596 | |
| | | 55 | 3 | 18 | 45 | -1602 | |
| | | 55 | 4 | 18 | 27 | -272.8 | |
| | | 55 | 5 | 8 | 9 | -7.728 | |
| | | 55 | 6 | 1 | 1 | -0.014 | |
| | | | | | | Etotal | -7471 |

| Símbolo | Elemento | Z | nx | Nx | Zx | Ex (Hartree) | |
|---------|-------------|----|----|----|----|-----------------|-------|
| Ba | Bario | 56 | 1 | 2 | 56 | -3103 | |
| | | 56 | 2 | 8 | 54 | -2699 | |
| | | 56 | 3 | 18 | 46 | -1683 | |
| | | 56 | 4 | 18 | 28 | -298.1 | |
| | | 56 | 5 | 8 | 10 | -10.11 | |
| | | 56 | 6 | 2 | 2 | -0.081 | |
| | | | | | | Etotal | -7793 |
| La | Lantano | 57 | 1 | 2 | 57 | -3216 | |
| | | 57 | 2 | 8 | 55 | -2804 | |
| | | 57 | 3 | 18 | 47 | -1766 | |
| | | 57 | 4 | 18 | 29 | -324.6 | |
| | | 57 | 5 | 9 | 11 | -13.49 | |
| | | 57 | 6 | 2 | 2 | -0.081 | |
| | | | | | | Etotal | -8123 |
| Ce | Cerio | 58 | 1 | 2 | 58 | -3330 | |
| | | 58 | 2 | 8 | 56 | -2911 | |
| | | 58 | 3 | 18 | 48 | -1851 | |
| | | 58 | 4 | 19 | 30 | -363.1 | |
| | | 58 | 5 | 9 | 11 | -13.49 | |
| | | 58 | 6 | 2 | 2 | -0.081 | |
| | | | | | | Etotal | -8468 |
| Pr | Praseodimio | 59 | 1 | 2 | 59 | -3447 | |
| | | 59 | 2 | 8 | 57 | -3019 | |
| | | 59 | 3 | 18 | 49 | -1938 | |
| | | 59 | 4 | 21 | 31 | -414.8 | |
| | | 59 | 5 | 8 | 10 | -10.11 | |
| | | 59 | 6 | 2 | 2 | -0.081 | |
| | | | | | | Etotal | -8829 |
| Nd | Neodimio | 60 | 1 | 2 | 60 | -3565 | |
| | | 60 | 2 | 8 | 58 | -3130 | |
| | | 60 | 3 | 18 | 50 | -2027 | |
| | | 60 | 4 | 22 | 32 | -459.4 | |
| | | 60 | 5 | 8 | 10 | -10.11 | |
| | | 60 | 6 | 2 | 2 | -0.081 | |
| | | | | | | Etotal | -9192 |

| Símbolo | Elemento | Z | nx | Nx | Zx | Ex (Hartree) |
|---------|------------|-----|----|----|-----|-----------------|
| Uns | Unilseptio | 107 | 1 | 2 | 107 | -11386 |
| | | 107 | 2 | 8 | 105 | -10599 |
| | | 107 | 3 | 18 | 97 | -8468 |
| | | 107 | 4 | 32 | 79 | -4889 |
| | | 107 | 5 | 32 | 47 | -920.3 |
| | | 107 | 6 | 13 | 15 | -23.82 |
| | | 107 | 7 | 2 | 2 | -0.059 |
| | | | | | | |
| Uno | Uniloctio | 108 | 1 | 2 | 108 | -11601 |
| | | 108 | 2 | 8 | 106 | -10806 |
| | | 108 | 3 | 18 | 98 | -8653 |
| | | 108 | 4 | 32 | 80 | -5030 |
| | | 108 | 5 | 32 | 48 | -969.5 |
| | | 108 | 6 | 14 | 16 | -28.91 |
| | | 108 | 7 | 2 | 2 | -0.059 |
| | | | | | | |
| Une | Unilenio | 109 | 1 | 2 | 109 | -11817 |
| | | 109 | 2 | 8 | 107 | -11014 |
| | | 109 | 3 | 18 | 99 | -8840 |
| | | 109 | 4 | 32 | 81 | -5173 |
| | | 109 | 5 | 32 | 49 | -1020 |
| | | 109 | 6 | 15 | 17 | -34.67 |
| | | 109 | 7 | 2 | 2 | -0.059 |
| | | | | | | |

ANEXO E

Energías Totales de los 109 elementos
calculados a partir del Modelo Geométrico
propuesto por Raúl W. Gómez González
y análisis por la Técnica de REGRESION LINEAL

| | Z | Sím | -Energía Total (Hartree) = -E | X | Y | X * Y |
|-----------|----|-----|--|-------|----------|-------|
| Hidrógeno | 1 | H | 0.5 | 0 | -0.69315 | 0 |
| Helio | 2 | He | 2.91421 | 0.693 | 1.0696 | 0.741 |
| Litio | 3 | Li | 7.45343 | 1.099 | 2.00867 | 2.207 |
| Berilio | 4 | Be | 14.4712 | 1.386 | 2.67216 | 3.704 |
| Boro | 5 | B | 24.3425 | 1.609 | 3.19222 | 5.138 |
| Carbono | 6 | C | 37.4424 | 1.792 | 3.6228 | 6.491 |
| Nitrógeno | 7 | N | 54.1458 | 1.946 | 3.99168 | 7.767 |
| Oxígeno | 8 | O | 74.8278 | 2.079 | 4.31519 | 8.973 |
| Flúor | 9 | F | 99.8633 | 2.197 | 4.6038 | 10.12 |
| Neón | 10 | Ne | 129.627 | 2.303 | 4.86466 | 11.2 |
| Sodio | 11 | Na | 162.997 | 2.398 | 5.09373 | 12.21 |
| Magnesio | 12 | Mg | 200.579 | 2.485 | 5.30121 | 13.17 |
| Aluminio | 13 | Al | 242.54 | 2.565 | 5.49117 | 14.08 |
| Silicio | 14 | Si | 289.047 | 2.639 | 5.66659 | 14.95 |
| Fósforo | 15 | P | 340.267 | 2.708 | 5.82973 | 15.79 |
| Azufre | 16 | S | 396.367 | 2.773 | 5.98234 | 16.59 |
| Cloro | 17 | Cl | 457.512 | 2.833 | 6.1258 | 17.36 |
| Argón | 18 | Ar | 523.87 | 2.89 | 6.26124 | 18.1 |
| Potasio | 19 | K | 594.948 | 2.944 | 6.38847 | 18.81 |
| Calcio | 20 | Ca | 671.035 | 2.996 | 6.50882 | 19.5 |
| Escandio | 21 | Sc | 753.731 | 3.045 | 6.62504 | 20.17 |
| Titanio | 22 | Ti | 842.287 | 3.091 | 6.73612 | 20.82 |
| Vanadio | 23 | V | 936.871 | 3.135 | 6.84255 | 21.45 |
| Cromo | 24 | Cr | 1039.45 | 3.178 | 6.94645 | 22.08 |
| Manganeso | 25 | Mn | 1144.79 | 3.219 | 7.04297 | 22.67 |
| Fierro | 26 | Fe | 1258.45 | 3.258 | 7.13764 | 23.26 |
| Cobalto | 27 | Co | 1378.81 | 3.296 | 7.22897 | 23.83 |
| Níquel | 28 | Ni | 1506.03 | 3.332 | 7.31723 | 24.38 |
| Cobre | 29 | Cu | 1643.2 | 3.367 | 7.4044 | 24.93 |
| Zinc | 30 | Zn | 1781.71 | 3.401 | 7.48533 | 25.46 |

| | | | | | | |
|-------------|----|----|---------|-------|---------|-------|
| Galio | 31 | Ga | 1926.43 | 3.434 | 7.56342 | 25.97 |
| Germanio | 32 | Ge | 2077.46 | 3.466 | 7.6389 | 26.47 |
| Arsénico | 33 | As | 2234.88 | 3.497 | 7.71194 | 26.96 |
| Selenio | 34 | Se | 2398.81 | 3.526 | 7.78273 | 27.44 |
| Bromo | 35 | Br | 2569.32 | 3.555 | 7.85139 | 27.91 |
| Kriptón | 36 | Kr | 2746.51 | 3.584 | 7.91809 | 28.37 |
| Rubidio | 37 | Rb | 2930.11 | 3.611 | 7.98279 | 28.83 |
| Estroncio | 38 | Sr | 3120.29 | 3.638 | 8.04568 | 29.27 |
| Itrio | 39 | Y | 3317.92 | 3.664 | 8.10709 | 29.7 |
| Zirconio | 40 | Zr | 3522.6 | 3.689 | 8.16695 | 30.13 |
| Niobio | 41 | Nb | 3735.31 | 3.714 | 8.22559 | 30.55 |
| Molibdeno | 42 | Mo | 3954.47 | 3.738 | 8.2826 | 30.96 |
| Tecnecio | 43 | Tc | 4180.97 | 3.761 | 8.3383 | 31.36 |
| Rutenio | 44 | Ru | 4414.9 | 3.784 | 8.39274 | 31.76 |
| Rodio | 45 | Rh | 4656.34 | 3.807 | 8.44599 | 32.15 |
| Paladio | 46 | Pa | 4906.58 | 3.829 | 8.49833 | 32.54 |
| Plata | 47 | Ag | 5162.17 | 3.85 | 8.54911 | 32.92 |
| Cadmio | 48 | Cd | 5424.95 | 3.871 | 8.59876 | 33.29 |
| Indio | 49 | In | 5695 | 3.892 | 8.64734 | 33.65 |
| Estaño | 50 | Sn | 5972.37 | 3.912 | 8.6949 | 34.01 |
| Antimonio | 51 | Sb | 6257.13 | 3.932 | 8.74148 | 34.37 |
| Teluro | 52 | Te | 6549.02 | 3.951 | 8.78707 | 34.72 |
| Iodo | 53 | I | 6849.02 | 3.97 | 8.83186 | 35.07 |
| Xenón | 54 | Xe | 7156.27 | 3.989 | 8.87574 | 35.41 |
| Cesio | 55 | Cs | 7465.11 | 4.007 | 8.918 | 35.74 |
| Bario | 56 | Ba | 7793.06 | 4.025 | 8.96099 | 36.07 |
| Lantano | 57 | La | 8123.25 | 4.043 | 9.00249 | 36.4 |
| Cerio | 58 | Ce | 8474.84 | 4.06 | 9.04486 | 36.73 |
| Praseodimio | 59 | Pr | 8828.86 | 4.078 | 9.08578 | 37.05 |
| Neodimio | 60 | Nd | 9191.76 | 4.094 | 9.12606 | 37.37 |
| Prometio | 61 | Pm | 9563.63 | 4.111 | 9.16572 | 37.68 |
| Samario | 62 | Sm | 9944.56 | 4.127 | 9.20478 | 37.99 |
| Europio | 63 | Eu | 10334.7 | 4.143 | 9.24326 | 38.3 |
| Gadolinio | 64 | Gd | 10724.9 | 4.159 | 9.28032 | 38.6 |
| Terbio | 65 | Tb | 11142.7 | 4.174 | 9.31854 | 38.9 |
| Disprosio | 66 | Dy | 11560.8 | 4.19 | 9.35538 | 39.2 |
| Holmio | 67 | Ho | 11988.5 | 4.205 | 9.3917 | 39.49 |
| Erbio | 68 | Er | 12425.8 | 4.22 | 9.42753 | 39.78 |
| Tulio | 69 | Tm | 12872.8 | 4.234 | 9.46287 | 40.07 |
| Iterbio | 70 | Yb | 13329.7 | 4.248 | 9.49775 | 40.35 |
| Lutecio | 71 | Lu | 13784.3 | 4.263 | 9.53128 | 40.63 |
| Hafnio | 72 | Hf | 14247.5 | 4.277 | 9.56434 | 40.9 |
| Tantalio | 73 | Ta | 14719.5 | 4.29 | 9.59693 | 41.18 |

| | | | | | | |
|-------------|-----|-----|---------|-------|---------|-------|
| Tungsteno | 74 | W | 15200.2 | 4.304 | 9.62907 | 41.44 |
| Renio | 75 | Re | 15689.3 | 4.317 | 9.66074 | 41.71 |
| Osmio | 76 | Os | 16188.4 | 4.331 | 9.69205 | 41.97 |
| Iridio | 77 | Ir | 16697.4 | 4.344 | 9.72301 | 42.23 |
| Platino | 78 | Pt | 17213.3 | 4.357 | 9.75344 | 42.49 |
| Oro | 79 | Au | 17739 | 4.369 | 9.78352 | 42.75 |
| Mercurio | 80 | Hg | 18272.8 | 4.382 | 9.81317 | 43 |
| Talio | 81 | Tl | 18815.3 | 4.394 | 9.84243 | 43.25 |
| Plomo | 82 | Pb | 19366.7 | 4.407 | 9.87131 | 43.5 |
| Bismuto | 83 | Bi | 19927 | 4.419 | 9.89983 | 43.75 |
| Polonio | 84 | Po | 20496.2 | 4.431 | 9.92799 | 43.99 |
| Astato | 85 | At | 21074.4 | 4.443 | 9.95581 | 44.23 |
| Radón | 86 | Rn | 21661.6 | 4.454 | 9.9833 | 44.47 |
| Francio | 87 | Fr | 22257.8 | 4.466 | 10.0104 | 44.71 |
| Radio | 88 | Ra | 22862.9 | 4.477 | 10.0373 | 44.94 |
| Actinio | 89 | Ac | 23477.4 | 4.489 | 10.0638 | 45.17 |
| Torio | 90 | Th | 24101.8 | 4.5 | 10.09 | 45.4 |
| Protactinio | 91 | Pa | 24742.8 | 4.511 | 10.1163 | 45.63 |
| Uranio | 92 | U | 25390.3 | 4.522 | 10.1421 | 45.86 |
| Neptunio | 93 | Np | 26047.6 | 4.533 | 10.1677 | 46.09 |
| Plutonio | 94 | Pu | 26714.9 | 4.543 | 10.193 | 46.31 |
| Americio | 95 | Am | 27392.3 | 4.554 | 10.218 | 46.53 |
| Curio | 96 | Cm | 28079.7 | 4.564 | 10.2428 | 46.75 |
| Berkelio | 97 | Bk | 28777.2 | 4.575 | 10.2673 | 46.97 |
| Californio | 98 | Cf | 29485 | 4.585 | 10.2916 | 47.19 |
| Einsteinio | 99 | Es | 30203 | 4.595 | 10.3157 | 47.4 |
| Fermio | 100 | Fm | 30931.3 | 4.605 | 10.3395 | 47.62 |
| Mendelevio | 101 | Md | 31670 | 4.615 | 10.3631 | 47.83 |
| Nobelio | 102 | No | 32419.1 | 4.625 | 10.3865 | 48.04 |
| Lawrencio | 103 | Lw | 33178.8 | 4.635 | 10.4097 | 48.25 |
| Kurchatovio | 104 | Ku | 33940.8 | 4.644 | 10.4324 | 48.45 |
| Hahnio | 105 | Ha | 34712.7 | 4.654 | 10.4549 | 48.66 |
| Unihexio | 106 | Unh | 35494.4 | 4.663 | 10.4771 | 48.86 |
| Uniseptio | 107 | Uns | 36285.9 | 4.673 | 10.4992 | 49.06 |
| Unioctio | 108 | Uno | 37087.4 | 4.682 | 10.521 | 49.26 |
| Unilenio | 109 | Une | 37898.8 | 4.691 | 10.5427 | 49.46 |

| | | | | | |
|----------|---|---------|---------|---------|-------|
| | Z | E | X | Y | X * Y |
| S U M A: | | 1246378 | 405.6 | 898.039 | 3565 |
| | | | N = 108 | N = 108 | |

Energías Totales de los 109 elementos
calculados a partir del Modelo Geométrico
propuesto por Raúl W. Gómez González
y análisis por la Técnica de REGRESION LINEAL
(continuación)

| Z | | Y ² | X ² | E ec | % Error |
|----|----|----------------|----------------|-------|---------|
| 1 | H | 0.48 | 0 | 0.534 | 6.743 |
| 2 | He | 1.144 | 0.48 | 2.783 | 4.489 |
| 3 | Li | 4.035 | 1.207 | 7.314 | 1.872 |
| 4 | Be | 7.14 | 1.922 | 14.52 | 0.308 |
| 5 | B | 10.19 | 2.59 | 24.7 | 1.481 |
| 6 | C | 13.12 | 3.21 | 38.14 | 1.871 |
| 7 | N | 15.93 | 3.787 | 55.07 | 1.71 |
| 8 | O | 18.62 | 4.324 | 75.7 | 1.168 |
| 9 | F | 21.19 | 4.828 | 100.2 | 0.365 |
| 10 | Ne | 23.66 | 5.302 | 128.8 | 0.615 |
| 11 | Na | 25.95 | 5.75 | 161.7 | 0.811 |
| 12 | Mg | 28.1 | 6.175 | 198.9 | 0.826 |
| 13 | Al | 30.15 | 6.579 | 240.7 | 0.751 |
| 14 | Si | 32.11 | 6.965 | 287.2 | 0.636 |
| 15 | P | 33.99 | 7.334 | 338.5 | 0.512 |
| 16 | S | 35.79 | 7.687 | 394.8 | 0.396 |
| 17 | Cl | 37.53 | 8.027 | 456.2 | 0.297 |
| 18 | Ar | 39.2 | 8.354 | 522.7 | 0.223 |
| 19 | K | 40.81 | 8.67 | 594.6 | 0.063 |
| 20 | Ca | 42.36 | 8.974 | 671.9 | 0.124 |
| 21 | Sc | 43.89 | 9.269 | 754.7 | 0.128 |
| 22 | Ti | 45.38 | 9.555 | 843.2 | 0.104 |
| 23 | V | 46.82 | 9.831 | 937.4 | 0.053 |
| 24 | Cr | 48.25 | 10.1 | 1037 | 0.197 |
| 25 | Mn | 49.6 | 10.36 | 1143 | 0.123 |
| 26 | Fe | 50.95 | 10.62 | 1255 | 0.244 |
| 27 | Co | 52.26 | 10.86 | 1374 | 0.385 |
| 28 | Ni | 53.54 | 11.1 | 1498 | 0.544 |
| 29 | Cu | 54.83 | 11.34 | 1628 | 0.897 |
| 30 | Zn | 56.03 | 11.57 | 1765 | 0.912 |

| | | | | | |
|----|----|-------|-------|-------|-------|
| 31 | Ga | 57.21 | 11.79 | 1909 | 0.909 |
| 32 | Ge | 58.35 | 12.01 | 2059 | 0.892 |
| 33 | As | 59.47 | 12.23 | 2216 | 0.865 |
| 34 | Se | 60.57 | 12.44 | 2379 | 0.83 |
| 35 | Br | 61.64 | 12.64 | 2549 | 0.79 |
| 36 | Kr | 62.7 | 12.84 | 2726 | 0.747 |
| 37 | Rb | 63.73 | 13.04 | 2910 | 0.69 |
| 38 | Sr | 64.73 | 13.23 | 3101 | 0.625 |
| 39 | Y | 65.72 | 13.42 | 3299 | 0.577 |
| 40 | Zr | 66.7 | 13.61 | 3504 | 0.531 |
| 41 | Nb | 67.66 | 13.79 | 3716 | 0.511 |
| 42 | Mo | 68.6 | 13.97 | 3936 | 0.471 |
| 43 | Tc | 69.53 | 14.15 | 4163 | 0.434 |
| 44 | Ru | 70.44 | 14.32 | 4397 | 0.401 |
| 45 | Rh | 71.33 | 14.49 | 4639 | 0.371 |
| 46 | Pa | 72.22 | 14.66 | 4888 | 0.369 |
| 47 | Ag | 73.09 | 14.82 | 5146 | 0.322 |
| 48 | Cd | 73.94 | 14.99 | 5410 | 0.272 |
| 49 | In | 74.78 | 15.15 | 5683 | 0.217 |
| 50 | Sn | 75.6 | 15.3 | 5963 | 0.159 |
| 51 | Sb | 76.41 | 15.46 | 6251 | 0.098 |
| 52 | Te | 77.21 | 15.61 | 6547 | 0.031 |
| 53 | I | 78 | 15.76 | 6851 | 0.029 |
| 54 | Xe | 78.78 | 15.91 | 7163 | 0.094 |
| 55 | Cs | 79.53 | 16.06 | 7483 | 0.242 |
| 56 | Ba | 80.3 | 16.2 | 7811 | 0.236 |
| 57 | La | 81.04 | 16.35 | 8148 | 0.303 |
| 58 | Ce | 81.81 | 16.49 | 8493 | 0.21 |
| 59 | Pr | 82.55 | 16.63 | 8846 | 0.191 |
| 60 | Nd | 83.29 | 16.76 | 9207 | 0.167 |
| 61 | Pm | 84.01 | 16.9 | 9577 | 0.139 |
| 62 | Sm | 84.73 | 17.03 | 9955 | 0.108 |
| 63 | Eu | 85.44 | 17.17 | 10342 | 0.073 |
| 64 | Gd | 86.12 | 17.3 | 10738 | 0.119 |
| 65 | Tb | 86.84 | 17.43 | 11142 | 0.009 |
| 66 | Dy | 87.52 | 17.55 | 11554 | 0.055 |
| 67 | Ho | 88.2 | 17.68 | 11976 | 0.105 |
| 68 | Er | 88.88 | 17.8 | 12406 | 0.157 |
| 69 | Tm | 89.55 | 17.93 | 12845 | 0.213 |
| 70 | Yb | 90.21 | 18.05 | 13293 | 0.272 |
| 71 | Lu | 90.85 | 18.17 | 13750 | 0.245 |
| 72 | Hf | 91.48 | 18.29 | 14216 | 0.218 |
| 73 | Ta | 92.1 | 18.41 | 14691 | 0.191 |

| | | | | | |
|-----|-----|-------|-------|-------|-------|
| 74 | W | 92.72 | 18.52 | 15175 | 0.163 |
| 75 | Re | 93.33 | 18.64 | 15669 | 0.132 |
| 76 | Os | 93.94 | 18.76 | 16171 | 0.107 |
| 77 | Ir | 94.54 | 18.87 | 16683 | 0.088 |
| 78 | Pt | 95.13 | 18.98 | 17204 | 0.057 |
| 79 | Au | 95.72 | 19.09 | 17734 | 0.03 |
| 80 | Hg | 96.3 | 19.2 | 18273 | 0.003 |
| 81 | Tl | 96.87 | 19.31 | 18822 | 0.037 |
| 82 | Pb | 97.44 | 19.42 | 19381 | 0.072 |
| 83 | Bi | 98.01 | 19.53 | 19949 | 0.108 |
| 84 | Po | 98.57 | 19.63 | 20526 | 0.145 |
| 85 | At | 99.12 | 19.74 | 21113 | 0.183 |
| 86 | Rn | 99.67 | 19.84 | 21710 | 0.222 |
| 87 | Fr | 100.2 | 19.94 | 22316 | 0.262 |
| 88 | Ra | 100.7 | 20.05 | 22932 | 0.302 |
| 89 | Ac | 101.3 | 20.15 | 23558 | 0.343 |
| 90 | Th | 101.8 | 20.25 | 24193 | 0.38 |
| 91 | Pa | 102.3 | 20.35 | 24839 | 0.388 |
| 92 | U | 102.9 | 20.45 | 25494 | 0.409 |
| 93 | Np | 103.4 | 20.54 | 26159 | 0.429 |
| 94 | Pu | 103.9 | 20.64 | 26835 | 0.448 |
| 95 | Am | 104.4 | 20.74 | 27520 | 0.466 |
| 96 | Cm | 104.9 | 20.83 | 28215 | 0.482 |
| 97 | Bk | 105.4 | 20.93 | 28920 | 0.498 |
| 98 | Cf | 105.9 | 21.02 | 29636 | 0.512 |
| 99 | Es | 106.4 | 21.12 | 30362 | 0.525 |
| 100 | Fm | 106.9 | 21.21 | 31097 | 0.537 |
| 101 | Md | 107.4 | 21.3 | 31843 | 0.548 |
| 102 | No | 107.9 | 21.39 | 32600 | 0.558 |
| 103 | Lw | 108.4 | 21.48 | 33367 | 0.566 |
| 104 | Ku | 108.8 | 21.57 | 34144 | 0.598 |
| 105 | Ha | 109.3 | 21.66 | 34931 | 0.629 |
| 106 | Unh | 109.8 | 21.75 | 35729 | 0.661 |
| 107 | Uns | 110.2 | 21.84 | 36537 | 0.693 |
| 108 | Uno | 110.7 | 21.92 | 37356 | 0.725 |
| 109 | Une | 111.1 | 22.01 | 38186 | 0.757 |

| | | |
|----------|----------------|----------------|
| | Y ² | X ² |
| S U M A: | 7931 | 1603 |
| | N = 108 | N = 108 |

REGRESION LINEAL

$$\begin{aligned} X &= \ln Z & N &= 108 \\ Y &= \ln(-E) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S(Y) &= 898.04 & S(Y^2) &= 7931 \\ S(X) &= 405.62 & S(X^2) &= 1603 \\ S(X*Y) &= 3565.4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B &= \frac{N \cdot S(X \cdot Y) - S(X) \cdot S(Y)}{N \cdot S(X^2) - (S(X))^2} \\ A &= \frac{S(Y) - B \cdot S(X)}{N} \\ R &= \frac{N \cdot S(X \cdot Y) - S(X) \cdot S(Y)}{\sqrt{[N \cdot S(X^2) - (S(X))^2] \cdot [N \cdot S(Y^2) - (S(Y))^2]}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B &= 2.3827 \\ A &= -0.628 = \ln(a) \text{ con } a = 0.534 \\ R &= 1 \end{aligned}$$

$$\ln(-E) = Y = BX + A = B \ln Z + A = 2.3827078 \ln Z - 0.627894$$

$$\ln(-E) = 2.3827078 \ln Z + \ln(0.533714)$$

$$\text{por lo que } \ln(-E) = \ln(0.533714 \cdot Z^{2.3827078})$$

$$-E = (0.533714 \cdot Z^{2.3827078})$$

Por tanto ésta es la ecuación que relaciona la Energía Total de los elementos en función de su Número Atómico Z de acuerdo con el Modelo de R. W. Gómez:

$$E = - (0.533714 \cdot Z^{2.3827078})$$

ANEXO F
Términos espectrales del estado fundamental
de los 109 elementos

| Z | Término | Z | Término | Z | Término |
|----|-------------------|----|--------------------|-----|--------------------|
| 1 | 2S | 38 | 1S | 75 | 6S |
| 2 | 1S | 39 | 2D _{3/2} | 76 | 5D ₄ |
| 3 | 2S | 40 | 3F ₂ | 77 | 4F _{9/2} |
| 4 | 1S | 41 | 6D _{1/2} | 78 | 3D ₃ |
| 5 | 2P _{1/2} | 42 | 7S | 79 | 2S |
| 6 | 3P ₀ | 43 | 6S | 80 | 1S |
| 7 | 4S | 44 | 5F ₅ | 81 | 2P _{1/2} |
| 8 | 3P ₂ | 45 | 4F _{9/2} | 82 | 3P ₀ |
| 9 | 2P _{3/2} | 46 | 1S | 83 | 4S |
| 10 | 1S | 47 | 2S | 84 | 3P ₂ |
| 11 | 2S | 48 | 1S | 85 | 2P _{3/2} |
| 12 | 1S | 49 | 2P _{1/2} | 86 | 1S |
| 13 | 2P _{1/2} | 50 | 3P ₀ | 87 | 2S |
| 14 | 3P ₀ | 51 | 4S | 88 | 1S |
| 15 | 4S | 52 | 3P ₂ | 89 | 2D _{3/2} |
| 16 | 3P ₂ | 53 | 2P _{3/2} | 90 | 3F ₂ |
| 17 | 2P _{3/2} | 54 | 1S | 91 | 4K _{11/2} |
| 18 | 1S | 55 | 2S | 92 | 5L ₆ |
| 19 | 2S | 56 | 1S | 93 | 6L _{11/2} |
| 20 | 1S | 57 | 2D _{3/2} | 94 | 9F ₀ |
| 21 | 2D _{3/2} | 58 | 1G ₄ | 95 | 8S |
| 22 | 3F ₂ | 59 | 4I _{9/2} | 96 | 9D ₂ |
| 23 | 4F _{3/2} | 60 | 5I ₄ | 97 | 6H |
| 24 | 7S | 61 | 6H _{5/2} | 98 | 5I |
| 25 | 6S | 62 | 7F ₀ | 99 | 4I |
| 26 | 5D ₄ | 63 | 8S | 100 | 3H |
| 27 | 4F _{7/2} | 64 | 9D ₂ | 101 | 2F |
| 28 | 3F ₄ | 65 | 6H _{15/2} | 102 | 1S |
| 29 | 2S | 66 | 5I ₈ | 103 | 2D |
| 30 | 1S | 67 | 4I _{15/2} | 104 | 3F |
| 31 | 2P _{1/2} | 68 | 3H ₆ | 105 | 4F |
| 32 | 3P ₀ | 69 | 2F _{7/2} | 106 | 5D |
| 33 | 4S | 70 | 1S | 107 | 6S |
| 34 | 3P ₂ | 71 | 2D _{3/2} | 108 | 5D |
| 35 | 2P _{3/2} | 72 | 3F ₂ | 109 | 4F |
| 36 | 1S | 73 | 4F _{3/2} | | |
| 37 | 2S | 74 | 5D ₀ | | |