

Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE QUIMICA



EXAMENES PROFESIONALES
FACULTAD DE QUIMICA

ESCALAS DE ELECTRONEGATIVIDAD
CORRELACION Y COMPLEMENTACION

TESIS MANCOMUNADA
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO
PRESENTAN

JUAN IBARRA CUELLAR
SATURNINO JUAN LOPEZ Y GAMIÑO

MEXICO, D. F.

1982



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis 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.

ESCALAS DE ELECTRONEGATIVIDAD
CORRELACION Y COMPLEMENTACION

INTRODUCCION.....pag. 1

CAPITULO I

Antecedentes.....pag. 5

Bibliografía.....pag. 13

CAPITULO II

Electronegatividad.....pag. 15

Electronegatividad de A.L. Allred and

E.G. Rochow.....pag. 18

Electronegatividad de Armas-Esparza..pag. 20

Electronegatividad de Gordy.....pag. 22

Electronegatividad de Mulliken.....pag. 23

Electronegatividad de Pauling.....pag. 26

Electronegatividad de Sanderson.....pag. 31

Bibliografía.....pag. 34

CAPITULO III

Método matemático.....pag. 37

Bibliografía.....pag. 44

CAPITULO IV

Resultados.....pag. 45

Relación del número atómico z , con - los valores de electronegatividad...pag.	51
Relación del número atómico z , con - el logaritmo natural de los valores- de electronegatividad.....pag.	61
Relación de los valores de electrone- gatividad de Armas-Esparza, con los- valores de electronegatividad.....pag.	70
Relación del logaritmo natural de -- los valores de electronegatividad de Armas- Esparza, con los valores de - electronegatividad.....pag.	79
Correlación por polinomios.....pag.	100
Bibliografía.....pag.	110

CAPITULO V

Conclusiones.....pag.	111
-----------------------	-----

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

El concepto de electronegatividad tiene un papel importante en la comprensión del comportamiento físico-químico de los diferentes elementos que constituyen a todas las sustancias que existen en la naturaleza. La importancia de la electronegatividad lo muestra, entre otros argumentos, la gran cantidad de estudios acerca de este tema, estudios que han originado diversidad de escalas de electronegatividad resultantes de las diferentes propiedades en las que se basan, así se tiene:

- a).- Escalas que relacionan a la electronegatividad con las propiedades de los átomos individuales: carga nuclear efectiva Z^* ; distribución de la carga Q ; relación de la estabilidad Sr ; función trabajo ϕ ; etc.

- b).- Escalas que relacionan a la electronegatividad con las propiedades resultantes de la interacción átomo-átomo cuando se forman las moléculas homo y heteronucleares: potenciales de ionización P.I.; radio covalente o iónico r ; afinidad electrónica---
A.E.; fuerza de atracción F; potencial---
eléctrico V; etc.

c).- Escalas que relacionan a la electronegatividad con las propiedades de las moléculas ya formadas: constante de fuerza de la molécula K ; frecuencia de vibración ν ; calor de reacción ΔH_r ; tipo de enlace y estructura de la molécula; etc.

Como es lógico suponer, al ser creado el concepto de electronegatividad como necesidad de intersección entre los resultados empíricos y teóricos, las diferentes escalas de electronegatividad presentan espacios en blanco, espacios originados por no tener el dato experimental para determinado elemento, es decir, dificultad no superada en el laboratorio para valorar o un ΔH_r ; o un potencial de ionización; o una frecuencia de vibración; etc.

Un análisis grosso modo de las bases de las diferentes escalas de electronegatividad nos llevarían a concluir que son enteramente ajenas. Sin embargo, se encuentra con frecuencia que al correlacionar los valores de una escala con otras, éstas difieren, solamente, en un factor constante de multiplicación, y de este modo, ellas pueden ser equivalentes en gran medida, lo que, paradójicamente, valida el concepto de electronegatividad y lo universaliza. Y es por esto precisamente, que en el presente trabajo de tesis se analizaron dos formas

de relacionar las diferentes escalas de electronegatividad más completas y de uso común, como son-- las escalas de: Allred y Rochow; Armas-Esparza;--- Gordy; Mulliken; Pauling y Sanderson. Además se--- pretendió utilizar dos métodos con el objeto de--- calcular, por interpolación o extrapolación, los valores de electronegatividad de aquellos elementos-- que no lo tienen en cualesquiera de las escalas--- antes mencionadas.

Las dos formas de relacionar las diferentes-- escalas consisten básicamente en:

i).- Relacionar cada una de las seis escalas de electronegatividad X , con el número atómico z , es decir, encontrar una expresión--- $X=F(z)$.

ii).- Tomar de las seis escalas de electronegatividad aquélla que esté más completa y-- relacionar las restantes a ésta. Para---- nuestro caso, la escala de electronegatividad de Armas-Esparza X_{omv} , por lo que-- la expresión buscada debe ser $X=F(X_{omv})$.

En lo que respecta a los métodos, se menciona que se pretendió usar dos por la razón siguiente:- El primer método que se ensayó fue el de los poli-

nomios de interpolación, en particular el de Newton, cuya principal característica es la de generar un polinomio de grado $n-1$ que pasa exactamente por todos y cada uno de los n puntos a relacionar; pero que, para efectos de la presente tesis, presenta el defecto de "dispararse" entre los puntos tratados, - en otras palabras: no se puede interpolar o extrapolar, situación que se comprobó con el primer polinomio obtenido, siendo esta la razón por la que sólo se consigna brevemente este método de trabajo en la presente tesis. El segundo método de trabajo es el de correlaciones lineales, y con éste se elaboró totalmente, verificando la hipótesis de linealidad -- con el coeficiente de correlación de Pearson del -- producto de momentos.

"Cuando la mente naufraga
una nueva palabra propor
ciona una balsa de salva
ción". Goethe

CAPITULO I

Antecedentes.

Uno de los arcanos que más ha llamado la atención desde que el hombre puso su observancia en los fenómenos químicos es: ¿Por qué en ocasiones se lleva a cabo una reacción y por qué en otras no se realiza? Así con este planteamiento, Tito Lucrecio Caro (98-55 A.C.) aborda esta problemática al plantear: "... los átomos, a medida que su propio peso los hace descender, se desploman en el vacío, en tiempos no bien determinados y en no bien definidos espacios y se desvían ligeramente de su curso -lo bastante para que se pueda decir que han cambiado de dirección-. Pues, si no tuvieran la tendencia a desviarse de la manera dicha, cada uno descendería como gota de lluvia por el vacío sin fondo y no podrían producirse choques ni encuentros entre los elementos primordiales, y, así, la naturaleza nunca habría producido nada..." (1).

El primer peldaño firme acerca de este misterio tiene su génesis cuando en 1808, Dalton considera a la materia formada por átomos, lo cual plantea la interrogante: ¿Qué extraña fuerza es la que une a los átomos entre sí, cuando éstos se combinan para formar una molécula? Concomitante a Dal-

ton, Davy estudiaba los efectos de la corriente -- eléctrica en los compuestos químicos (2), estudios que probablemente tuvieron valía para que Berze- - lius (3), en 1811 estableciera que la unión quími- ca se logra por atracción eléctrica entre partícu- las de carga opuesta, clasificando los átomos en - electropositivos y electronegativos.

En este punto es menester hacer un alto para- comentar que nos encontramos entre 1811-14, y que - el electrón como unidad "natural de electricidad", es planteada hasta 1874 por Johnstone Stoney (4), - y evaluado por el mismo Stoney en 0.3×10^{-10} uni- dades electrostáticas absolutas, valor muy infe- - rior al verdadero, dado en 1897 por Thomson de -- 6.5×10^{-10} unidades electrostáticas absolutas, por lo que plantear:

"...que la teoría de la unión química de Berzelius es resultado del descubrimiento de electrón (5), y en consecuencia de la naturaleza eléctrica de la - materia..." es apócrifo.

En 1852 Frankland (6) asigna el poder de com- binación de los átomos, de acuerdo con el número - de átomos de hidrógeno con que se combinan, y de - aquí nace el concepto de lo que después se conoce - ría como "Valencia".

En 1861 el concepto de "estructura química" - es utilizado por vez primera, con la finalidad de mostrar: como se unen los átomos de la molécula entre sí (7), siendo Van't Hoff (8) y Le Bell (9) -- quienes en 1874 dan forma final a la estereoquímica clásica, estereoquímica que es completada en -- 1893 por Werner (10) con sus trabajos acerca de -- complejos inorgánicos, y son precisamente éstos -- trabajos de Werner, los que determinan cierta invalidéz en la teoría clásica de Berzelius.

Para este tiempo era común el empleo del concepto estructura molecular, pero solamente en su -- aspecto cualitativo, ya que la naturaleza de la -- unión continuaba desconocida, aun cuando ya se conocían algunos de los valores de distancia interatómica y de los ángulos de unión, gracias a los -- trabajos de Max Von Laue, W. L. Bragg y de W.H. -- Bragg.

En 1916, Lewis (11), dio la debida importancia al hecho de que moléculas como NO_2 con número total impar de electrones (23 electrones) tenderían a unirse espontáneamente formando moléculas de peso molecular doble, en este caso N_2O_4 (con 46 electrones). Lewis, auxiliado por Langmuir desarrolló una teoría sobre el enlace de los átomos, sugerida

por la observación anterior, utilizando además las ideas de Abegg y de Kossel. Según Lewis, los átomos se unirían siempre con tendencia a formar conjuntos de átomos (moléculas), con número par de electrones uniendo sus últimos pisos, de tal modo - que cada uno de los átomos unidos tuviese 8 electrones en su piso periférico. Introduce además, - el concepto de polaridad, la cual es considerada - como resultado de un desplazamiento del centro de gravedad de la nube electrónica del enlace hacia - uno de los átomos, lo cual hace que este sea electronegativo en una molécula dada.

Y así, fue comunmente aceptada la clasificación de las uniones químicas en iónicas y covalentes, aunque a veces, la estructura real de una molécula teniendo en cuenta los datos experimentales sobre: distancias internucleares, energías de enlace, etc., no puede ser representada por una estructura única, iónica o covalente, sino que "parece - ser que" tienen un poco de las dos, a lo cual Heisenberg (12) en 1926, a raíz de su estudio del átomo de helio, llamó resonancia.

Es este concepto el que delimita en el tiempo, el inicio del estudio teórico de la naturaleza de las uniones, siendo el átomo más sencillo el hidró

geno, el conejillo de indias.

Heitler y London (13) en 1927, calcularon la distancia que guardan los átomos de hidrógeno en la molécula de hidrógeno, así como la energía de unión. Consideraron a cada átomo como el conjunto de un protón y un electrón, y al sistema formado por (protón + electrón) + (protón + electrón), aplicaron las ecuaciones de la mecánica ondulatoria y calcularon las funciones de onda para ambos electrones en relación con cada núcleo, con el fin de establecer que "ambos electrones pertenecen tanto a un núcleo como al otro", condición precisa para considerar unidos a los dos átomos. Los resultados que se obtuvieron: (14) para la distancia entre los núcleos fue de 0.86 Å, y una energía de unión de 3.14 e.v.. Experimentalmente se han obtenido: distancia de 0.741 Å, energía de 4.747 e.v..

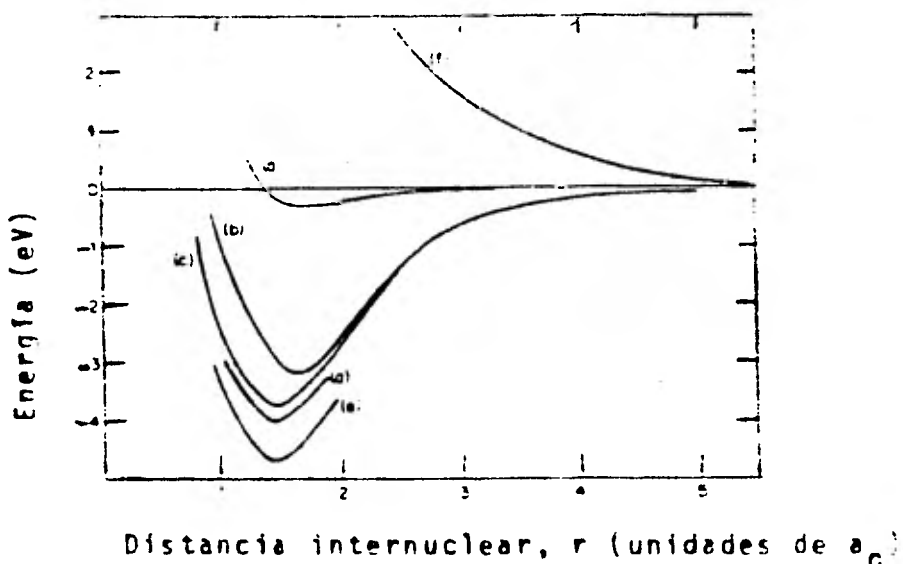
En 1928, Wang (15), mejoró la función de onda en forma sencilla, sólo agregó la carga nuclear efectiva, que se hizo variar hasta llevar la energía a un mínimo, obteniendo una distancia de 0.743 Å y una energía de 3.78 e.v..

En 1933, Weinbaum (16), realiza estudios de la molécula de hidrógeno considerando dos estructu

ras iónicas, obteniendo una distancia de 0.749 Å y una energía de 4.02 e.v..

Un tratamiento teórico satisfactorio fue dado por James y Coolidge (17) en 1933, encontrando una distancia de 0.741 Å y una energía de 4.747 e.v., - pues tomaron en cuenta la interacción entre los -- electrones.

La figura siguiente nos muestra las diferen-- tes gráficas que obtuvieron los autores antes men-- cionados:



Funciones de onda para la molécula de hidrógeno:

Curva a, función de onda no corregida.

Curva b, Heitler-London, introducen a la función de onda no corregida la resonancia covalente.

Curva c, Wang, Heitler-London + carga nuclear efectiva.

Curva d, Weinbaum, Wang + resonancia entre estructuras iónicas.

Curva e, James-Coolidge, Weinbaum + interacción entre electrones.

Curva f, posibilidad de que no exista el enlace entre los dos átomos de hidrógeno por tener sus electrones spins paralelos (5).

En el siguiente capítulo se hace ya de manera particular, énfasis de las causas que originaron, en Pauling, la necesidad de "crear" el concepto de electronegatividad, como un descanso, en la espiral que existe entre las vivencias y las cavilaciones de la erudición.

Es importante señalar, que el presente desarrollo histórico llamado por nosotros: antecedentes, en sentido estricto está inconcluso, ya que -

solamente se ha hecho referencia a aquello que hemos considerado importante y esta consideración -- tiene, obviamente, cierto grado de subjetividad. Queda pues, abierto el camino para los amantes de las crónicas y anales, a que completen éste desarrollo histórico.

B I B L I O G R A F I A

- 1.- *Antología de Física*
Arturo Noyola Isgleas
U.N.A.M., 1971.
- 2.- *Química-Física*
Gordon M. Barrow,
Ed. Reverté, 1964.
- 3.- *Berzelius, J. - J.Phys.Chem. 73,253,(1811).*
- 4.- *Tratado de Química Inorgánica*
Modesto Bargalló,
Ed. Porrúa, 1962.
- 5.- *Tesis Profesional,*
Contribución al análisis crítico del con-
cepto de electronegatividad.
José de Jesús Ruíz Guillén,
Fac. de Química, U.N.A.M. (1976).
- 6.- *Frankland, E. - Phil, Trans. Roy. Soc.*
London 142, 417, (1852).
- 7.- *Butlerov, A. M. - Z. Chem. Pharm.4,549,*
(1861).

- 8.- Van't Hoff, J. H. - Arch. Neerland. Sci.
9,445 (1874).
- 9.- Le Bell, J.A. - Bull. Soc. Chim. France
22,337 (1874).
- 10.- Werner, A. - Anorg. Chem. 3,267 (1893).
- 11.- Lewis, G. N. - J. A. C. S. 38,762 (1916).
- 12.- Heisemberg, W. - Z. Physik 39,499 (1926).
- 13.- Heitler, W. and London, F. - Z. Physik
44,455 (1927).
- 14.- Inorganic Chemistry, James E. Huheey.
Harper & Row Pubs. N.Y. 1972.
- 15.- Wang, S.C. - Phys. Rev. 31,579 (1928).
- 16.- Weinbaum, S. - J. Chem. Phys. 1,593 (1933).
- 17.- James, H. M. and Coolidge, A. S. - J. -
Chem. Phys. 1,825 (1933).

dos en: Allred, Armas-Esparza, Gordy, Mulliken, -- Pauling y Sanderson.

Métodos para la determinación de electronegatividad.

Existe, como ya se indicó, una variedad amplia de métodos para la determinación de electronegatividad, variación que hemos agrupado en tres rubros:

- i-Métodos que utilizan propiedades de los átomos individuales como: carga nuclear efectiva Z^* , distribución de la carga Q , relación de estabilidad SR , función trabajo ϕ , etc.
- ii-Métodos que utilizan las propiedades resultantes de la interacción átomo-átomo, cuando se forman las moléculas: potenciales de ionización $P.I.$, radio covalente o iónico r , afinidad electrónica AE , fuerza de atracción F , el potencial eléctrico V , etc.
- iii-Métodos que utilizan las propiedades de las moléculas ya formadas: la constante K de la fuerza de la molécula, la frecuencia de vibración ν , el calor de reacción ΔH_r , el tipo de enlace y estructura de la molécula, por ciento de carácter iónico, polaridad, etc.

El entrar en detalle de los métodos antes citados no se realiza en el presente trabajo de tesis por dos razones principalmente, no es objetivo de este trabajo de tesis, y, aunque lo fuese, ya está hecho, de forma muy amplia, en el análisis elaborado por José de Jesús Ruíz Guillén (1), por lo que recomendamos la lectura de esta monografía a las personas interesadas en los pormenores de los métodos precedentes.

CAPITULO II

Electronegatividad.

El estudio de las uniones heteronucleares conllevó al concepto de electronegatividad. Este es simultáneamente uno de los más importantes y uno de los más difíciles problemas en química. Con excepción de algunos radicales libres y reacciones heterocíclicas, la química es sobre todo, la interacción de iones y moléculas polares; esto es aún más, probablemente, característico en química inorgánica; tales tópicos como: reacciones ácido-base, momentos dipolos, química de coordinación y química de los no metales, están íntimamente asociados con la separación de cargas.

Es bien sabido que existen múltiples métodos para calcular electronegatividades, de igual forma como existe una variedad de medicamentos para una enfermedad en particular, lo cual es un indicador de lo inadecuado de todos ellos; pero, paradójicamente es al mismo tiempo una muestra del atractivo que posee éste concepto "creado" por Pauling.

En el presente capítulo, de forma muy sucinta, se mencionan los diferentes procedimientos o métodos para el cálculo de electronegatividades basa-

Electronegatividad de A.L. Allred and E.G. Rochow.

Con base en diversas mediciones físicas, Allred y Rochow empezaron a sospechar que el orden convencional de electronegatividad para los elementos -- del grupo IV A (Si, Ge, Sn y Pb) no era correcto y sugieren (2) que el valor constante dado por Pauling para la electronegatividad del Si, Ge, Sn y Pb, de 1.8 no se ajustaba a las propiedades de estos elementos, ya que la tendencia, en general, del germanio a semejarse al carbono indica que la electronegatividad de este, el germanio, debe ser más grande que la del silicio y por lo tanto más cercana a la del carbono.

En 1958, Allred y Rochow publican (3): "una escala de electronegatividad basada en la fuerza electrostática" cuyo objetivo fue presentar una escala de electronegatividad basada en la fuerza de atracción que existe entre uno de los núcleos y un electrón involucrado en el enlace.

Si r es la distancia entre un núcleo y un electrón, e es la carga del electrón y eZ^* es la carga nuclear efectiva alrededor del núcleo, la fuerza de atracción se puede hallar por:

$$F = \frac{e^2 Z^*}{r^2} \dots\dots\dots (2.1)$$

La fuerza que se calcula con la ecuación (2.1) es propuesta como una medida aproximada de la atracción que un átomo, en una molécula, ejerce sobre los electrones del enlace.

La magnitud $\frac{Z^*}{n^2}$ representa la electronegatividad absoluta (3) y difiere de los valores relativos de Pauling.

La carga nuclear efectiva: Z^* fue determinada por las reglas de Slater (4).

Electronegatividad de Armas-Esparza.

En 1973, Armas-Esparza (5) calcularon los valores del módulo de la electronegatividad para 86-elementos siguiendo esencialmente la fórmula de Allred-Rochow, salvo las siguientes modificaciones:

- 1.- Calculan la carga nuclear efectiva Z^* por el método del campo autoconsistente y evaluada por Clementi y Raimondi, (6), (7), (8) y (9), en lugar de los parámetros de Slater empleados por Allred-Rochow.
- 2.- Emplean los valores de los radios de los orbitales máximos de valencia (OMV), calculados por Waber y Cromer (10), con base en funciones de onda no relativísticas de Hartree-Fock, en lugar de los radios covalentes de Pauling empleados por Allred-Rochow.

Basados en lo anterior:

$$\text{Módulo de electronegatividad} = \frac{Z^*}{n^2 \text{OMV}} \dots (2.2)$$

Este módulo de electronegatividad designado por Armas-Esparza como electronegatividad del orbital máximo de valencia, se basa en las fuerzas de-

atracción entre el núcleo de un átomo y el electrón en el orbital máximo de valencia, de donde se deduce que "La habilidad de un átomo, en una molécula, para atraer electrones hacia sí mismo depende de los orbitales usados en el enlace".

Electronegatividad de Gordy.

Gordy y Orville (11) encontraron una correlación entre los valores de su función trabajo ϕ .

La función trabajo ϕ de los metales es la cantidad de energía requerida para sacar un electrón del metal, dada por la frecuencia límite de la luz en el efecto fotoeléctrico o por el término de energía en el factor de Boltzman de la expresión teórica para la emisión termoiónica. Al graficar la función trabajo ϕ contra la electronegatividad de los metales, observaron una relación lineal entre ambas cantidades.

La ecuación de la recta obtenida es la siguiente:

$$X = 0.44 \phi - 0.15 \dots\dots\dots(2.3)$$

Donde ϕ es la función trabajo en electron-volts y X es la electronegatividad de Pauling.

Electronegatividad de Mulliken.

Tiempo después de Pauling, Mulliken (12) propuso una nueva escala de electronegatividad "absoluta" basada en el potencial de ionización I y en la afinidad electrónica A.E.

El siguiente examen cualitativo menciona las ideas básicas del razonamiento que lo llevaron a proponer la nueva función para medir la electronegatividad:

En general, la función de onda $\Psi(AB)$ de una molécula AB, donde A y B son ambos átomos univalentes, puede ser aproximada por una combinación lineal de una función de onda que contiene el estado covalente A - B y los estados iónicos A^+B^- y A^-B^+ dada por:

$$\Psi(AB) = \gamma \Psi(A-B) + \alpha \Psi(A^+B^-) + \beta \Psi(A^-B^+) \dots (2.4)$$

cuando A y B son átomos idénticos se tiene una unión covalente no polar pura y γ es mucho mayor que α y β .

Para A y B diferentes pero con el mismo grado de electronegatividad los términos correspondientes a A^+B^- y A^-B^+ aparecen con $\alpha = \beta$.

Para una molécula altamente polar con A positivo, α es mucho mayor que γ y β .

Una manera de determinar teóricamente cuando $\alpha = \beta$, además de la condición evidente cuando $A \equiv B$ sería la siguiente:

Supongamos que tenemos un caso donde la energía requerida para producir $A^+ + B^-$ de $A + B$ es la misma que la requerida para producir $A^- + B^+$ aproximándose mutuamente sin deformación hasta que la distancia entre sus núcleos tiene el valor de r_e de la molécula real $A-B$; sucediendo lo mismo con A^- y B^+ . Si la energía cedida en los dos casos es la misma, entonces la energía neta de las dos formas imaginadas $A^+ B^-$ y $A^- B^+$ deberá ser la misma para $r = r_e$. Entonces en la molécula real de acuerdo con la mecánica cuántica ambas formas deben participar igualmente, o sea, $\alpha = \beta$ en la ecuación (2.4) siempre y cuando A y B tengan la misma electronegatividad. En la realidad no podemos esperar las condiciones mencionadas; en particular aquella de igual energía de atracción. Sin embargo, como un postulado tentativo y sujeto a demostrarse empíricamente, supongamos que esta diferencia entre $A^+ B^-$ y $A^- B^+$ puede despreciarse, --

entonces se puede asegurar que:

$$I_A - E_B = I_B - E_A \dots\dots\dots (2,5)$$

donde I y E son los potenciales de ionización y afinidad electrónica respectivamente.

Si la ecuación anterior se cumple tenemos que:

$$I_A + E_A = I_B + E_B \dots\dots\dots (2.6)$$

o bien

$$\frac{I_A + E_A}{2} = \frac{I_B + E_B}{2} \dots\dots\dots (2.7)$$

Esta igualdad de cantidades para dos átomos - es un criterio aproximado para su igual participación en una unión química. De acuerdo a la ecua--ción (2.7) dos átomos univalentes tienen igual electronegatividad si la suma o el promedio de su potencial de ionización y afinidad electrónica es la misma para cada uno; es decir que "la electronegatividad absoluta de un átomo es igual al prome--dio de su potencial de ionización y de su afinidad electrónica". Esta definición implica que la elec

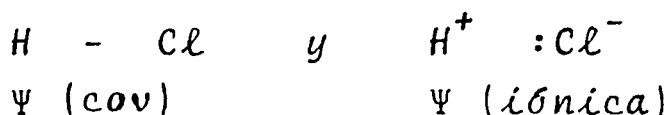
Electronegatividad de Pauling.

En 1932 Linus Pauling (13), define el concepto de electronegatividad de una forma empírica, para poder tener un puente de unión entre los resultados teóricos y los observados en el laboratorio.

Los resultados que se obtienen del estudio teórico para la molécula de hidrógeno y su alta concordancia con los resultados experimentales, permite generalizar el modelo de unión H-H, a todas las moléculas con átomos iguales (homonucleares) en donde este enlace representa una posición extrema, en la que los electrones están distribuidos de una forma uniforme y con el solo término covalente resulta acabada la descripción (14).

Sin embargo en las moléculas con átomos desiguales (heteronucleares) es válido pensar que la distribución de los electrones en el enlace es diferente a las moléculas homonucleares y por lo tanto acepta la posibilidad de que los electrones que enlazan estén asociados más íntimamente con un núcleo que con otro, es decir, la distribución de los electrones de un enlace heteronuclear puede interpretarse como una combinación de un término covalente y un término iónico, por ejemplo: el enla-

ce HCl se interpreta como combinación de términos que son funciones de onda que corresponden a las configuraciones:



y la ecuación que considera esta descripción es $\Psi = A \Psi (\text{cov}) + b \Psi (\text{iónica})$ (14), de donde se deduce que la energía de enlace para el HCl debe ser mayor, en $b \Psi (\text{iónico})$, que la energía asociada a una descripción sólo covalente. Este razonamiento, teórico, conlleva a una barrera harto difícil: la existencia de demasiados electrones para poder -- realizar los cálculos de mecánica-cuántica, situación que, recordemos, no se presenta para el hidrógeno.

Pauling (15) pretende resolver este problema empíricamente enunciado el postulado de Aditividad de las Uniones Covalentes Normales; considerando que "dado que una unión covalente normal -- A - B es de carácter similar a las uniones A - A y B - B, esperamos que los valores de la energía de unión sean intermedios entre los valores para A - A y B - B" (13), pág. 80..... "Es decir, su ponemos que la media aritmética de los dos valo--

res de las energías de unión $D(A - A)$ y $D(B - B)$ es la energía de la unión covalente normal entre los átomos diferentes A y B" (13).

Por lo tanto:

$$D(A - B) = 1/2 \{D(A - A) + D(B - B)\} \dots (2.8)$$

Pauling en su artículo (16), a partir de las energías de unión de la molécula de hidrógeno y de los halógenos, predice utilizando el concepto de aditividad, las energías de enlace de los halógenos de hidrógeno y los halogenuros de halógeno; y los comparó con los obtenidos de datos termoquímicos, encontrando que generalmente las energías de unión termoquímicas son mayores o iguales que las energías de unión obtenidas por aditividad.

La diferencia entre la energía de unión termoquímica y la energía de unión obtenida por aditividad es debida a la energía de unión adicional con que contribuye las estructuras de carácter iónico, a la que define como Energía de Resonancia-Iónica (Δ).

$$\Delta = D(A - B) - 1/2 \{D(A - A) + D(B - B)\} \dots (2.9)$$

Esta Δ , proporcionará la cantidad de carác--

ter iónico del enlace en la molécula.

Debido a que la energía de resonancia iónica, para cada uno de los casos, fue variando conforme a la diferencia en carácter entre los átomos que formaban el enlace, y como dicha variación entre los átomos, de algún modo tenía relación con las características del átomo en sí, Pauling pensó en que la energía de resonancia iónica y en consecuencia la naturaleza del enlace, se podía relacionar a una cierta propiedad o capacidad interna en cada átomo. Es entonces cuando Pauling ve la necesidad de crear un concepto que describa esa cierta capacidad del átomo, que necesariamente tenía que relacionarse con los electrones que le circundan.

De esta manera Pauling define el concepto de electronegatividad como: "La capacidad de un átomo en una molécula de atraer electrones hacia él" - - (13), (15), (16).

Dicha electronegatividad, por tanto, debía -- ser característica para cada átomo y relacionarse con el enlace de un átomo en la molécula; estableció que la energía de resonancia iónica estaba íntimamente ligada a la diferencia de electronegatividades entre los dos átomos que forman el enlace, de la siguiente manera (16):

$$(X_A - X_B) = 0.208 \sqrt{\Delta} \dots\dots\dots (2.10)$$

donde:

Δ = Energía de resonancia iónica en Kcal/mol

X_A = Electronegatividad del átomo A

X_B = Electronegatividad del átomo B

Atribuyendo un valor de cero para la electronegatividad del hidrógeno en sus primeros cálculos, posteriormente le asigna el valor de 2.1 y con este valor obtuvo la electronegatividad de 33 elementos (13).

Electronegatividad de Sanderson.

Cuando dos átomos se unen para formar un compuesto, se produce un ajuste en la distribución de los electrones de valencia y en el tamaño de las esferas electrónicas, que se visualiza en la polaridad de la molécula; el átomo con mayor atracción inicial por sus electrones de valencia adquiere -- una carga parcial negativa y expande su esfera electrónica con una consecuente disminución en la atracción por sus electrones de valencia. De igual manera el átomo que tiene inicialmente menor atracción por sus electrones de valencia, adquiere una carga parcial positiva, de lo que resulta una contracción de su esfera electrónica y una consecuente mayor atracción del núcleo por sus electrones de valencia.

Es decir que en la combinación de dos átomos para formar una unión covalente, el átomo más electronegativo expande su esfera electrónica disminuyendo su electronegatividad y el átomo menos electronegativo se contrae aumentando su electronegatiividad hasta que la atracción de ambos átomos por sus electrones de valencia se igualan.

Sanderson (17) encontró una relación entre la la

electronegatividad, el tamaño y carga de la esfera electrónica, observando las diferencias químicas - entre los átomos de los gases nobles y los iones - isoelectrónicos. Estos iones difieren de los gases nobles no sólo en carga nuclear sino en el empaquetamiento de sus electrones.

El grado de empaquetamiento puede ser expresado como la "densidad electrónica promedio D.E."; - expresada en número de electrones por Angstrom cú bico en la siguiente ecuación:

$$D. E. = \frac{Z}{4.19 r^3} \dots\dots\dots (2.11)$$

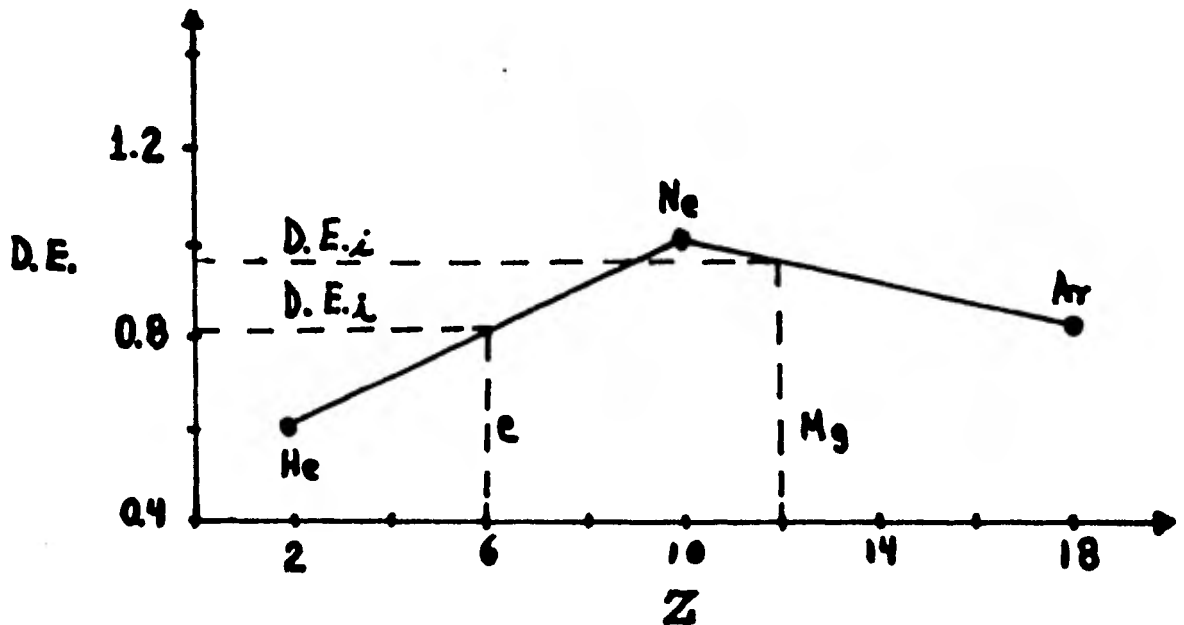
donde Z es el número de electrones, r el radio iónico o covalente no polar. Al calcular las densidades electrónicas promedio de los gases nobles se encontró que las densidades electrónicas de los ca tiones son mayores y la de los aniones son menores que la de los correspondientes átomos de gases nobles.

Al postular que la gran estabilidad química - de los elementos inertes se debe a su número de electrones y a su densidad electrónica; la electro negatividad relativa o atracción relativa que ejer

ce sobre sus electrones de valencia un átomo o ión de un elemento activo se puede expresar como " la relación entre su densidad electrónica a la densidad electrónica de un hipotético átomo inerte isoelectrónico R.S.":

$$R.S. = \frac{D.E.}{D.E._i} \dots\dots (2.12)$$

donde D.E. es la densidad electrónica promedio de un elemento, y D.E._i la densidad electrónica promedio de un hipotético elemento isoelectrónico inerte determinada por interpolación lineal de los valores de densidad electrónica del gas noble anterior y posterior al elemento en cuestión, tal como se muestra en la figura siguiente:



B I B L I O G R A F I A

- 1.- Ruíz Guillén, José de J. - Contribución al análisis crítico del concepto de electronegatividad. Tesis profesional, F. Q. UNAM (1976).
- 2.- James C. Huheey. - Inorganic, Chemistry, Harper and Row Publishers (1972).
- 3.- A.L. Allred and E.E. J. - Inorg. Nucl. Chem. 5, 269, (1958).
- 4.- J. C. Slater. - Phys. REV. 36, 57, (1930)
- 5.- Esparza F. H., Armas C. - Cálculo de electronegatividad del orbital máximo de valencia para 86 elementos. Trabajo presentado al IX Congreso Mexicano de - Química Pura y Aplicada. Mayo 1974.
- 6.- Clementi, E. - J. Chem. Phys. 38, 996, (1963).
- 7.- Clementi, E. - J. Chem. Phys. 38, 1001, (1963).

- 8.- Clementi, E. y Raimondi, D.L. - J.Chem. Phys. 38, 2886, (1963).
- 9.- Clementi, E. - J. Chem. Phys. 47, 1300, (1967).
- 10.- Waber, S.T. and Cromer, D.T. - J. Chem. Phys. 42, 4116, (1965).
- 11.- Gordy, W. and Orville, Thomas, W.J. - J. Chem. Phys. 24, 439, (1956).
- 12.- Mulliken, R. - J. Chem. Phys. 2, 782, (1934).
- 13.- Pauling, L. - The Nature of Chemical bond. Cornell University Press, Ithaca, New York, 3 rd, Ed. (1960).
- 14.- Gordome M. Barrow. - Química-física, Ed. Reverte (1964)
- 15.- Pauling, L. and Yost, D.M. - Proc. Nat. Acad. Sci. U. S. 18, 414, (1932).
- 16.- Pauling, L. - J. A. C. S. 54, 3570 (1932).
- 17.- Sanderson, R.T. - Periodicidad química, Ed. Aguilar (1964)

CAPITULO III

Método matemático

William Thomson (1824-1907) mencionaba: " frecuentemente digo que cuando usted puede medir aquello de lo que está hablando, y expresarlo en números, usted sabe algo de ello; pero cuando usted no puede expresarlo en números, su conocimiento es pobre y de una calidad poco satisfactoria; puede ser el principio del conocimiento, pero en sus pensamientos usted apenas ha avanzado a un estado de ciencia, cualquiera que sea el asunto de que se trate ". Es claro que Thomson se refería al hecho de utilizar un modelo matemático, modelo matemático -- que permite hacer consideraciones dentro y fuera -- del intervalo de las observaciones.

El método mas usado para "transformar" observaciones a modelo matemático, es el de mínimos cuadrados, pues es la ecuación de una recta la que mas fácilmente podemos manipular.

En el presente capítulo se utiliza el método de mínimos cuadrados, así como la verificación de la hipótesis de linealidad de la dependencia funcional (correlación).

Cuando se busca una dependencia funcional o correlación entre una variable independiente X y -- una variable dependiente Y , interesan los siguientes problemas (1):

i).- Estimar las magnitudes de los parámetros de la dependencia funcional y los valores de Y correspondientes a ciertos valores de X .

ii).- Verificar la hipótesis de linealidad de la dependencia funcional (correlación).

i).- Estimar las magnitudes de los parámetros de la dependencia funcional:

La dependencia funcional buscada es del tipo:
 $y = a + bx$, la cual es una relación lineal donde:

y = Variable dependiente.

a = Ordenada al origen de la recta.

b = Pendiente de la recta.

x = Variable independiente.

Los parámetros a , y b se estiman por el llamado método de mínimos cuadrados que se describe a -- continuación.

Una función $F(X)$ es conocida en un conjunto de puntos tabulares distintos, cuyos valores deberán estar comprendidos en el intervalo $\{X_0, X_n\}$, y el problema es determinar la recta $y = a + bx$ que realice la mejor aproximación a la función tabulada.

$$\text{Si } F(X) = a + bx \dots\dots\dots(3.1)$$

con los coeficientes a , y b escogidos de tal manera que:

$$S = \sum_{i=0}^n \{y_i - F(X_i)\}^2 = \sum_{i=0}^n \{y_i - a - bx_i\}^2 \dots\dots(3.2)$$

sea mínima. S es una función de a , y b ; por lo tanto $S = S(a, b)$ que debe obtenerse haciendo:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial S}{\partial b} = 0$$

de donde:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \sum_{i=0}^n y_i - (n+1)a - b \sum_{i=0}^n x_i \dots\dots\dots(3.3)$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = \sum_{i=0}^n x_i y_i - a \sum_{i=0}^n x_i - b \sum_{i=0}^n x_i^2 \dots\dots\dots(3.4)$$

o bien:

$$a(n+1) + b \sum_{i=0}^n x_i = \sum_{i=0}^n y_i \dots \dots \dots (3.5)$$

$$a \sum_{i=0}^n x_i + b \sum_{i=0}^n x_i^2 = \sum_{i=0}^n x_i y_i \dots \dots \dots (3.6)$$

resolviendo por determinantes:

$$a = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=0}^n y_i & \sum_{i=0}^n x_i \\ \sum_{i=0}^n x_i y_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n+1 & \sum_{i=0}^n x_i \\ \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 \end{vmatrix}} = \frac{\sum_{i=0}^n y_i \sum_{i=0}^n x_i^2 - (\sum_{i=0}^n x_i y_i) (\sum_{i=0}^n x_i)}{(n+1) \sum_{i=0}^n x_i^2 - (\sum_{i=0}^n x_i)^2} \dots \dots \dots (3.7)$$

$$b = \frac{\begin{array}{|l|l|} \hline n+1 & \sum_{i=0}^n y_i \\ \hline \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i y_i \\ \hline \end{array}}{\begin{array}{|l|l|} \hline n+1 & \sum_{i=0}^n x_i \\ \hline \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 \\ \hline \end{array}} = \frac{(n+1)\sum_{i=0}^n x_i y_i - (\sum_{i=0}^n x_i)(\sum_{i=0}^n y_i)}{(n+1)\sum_{i=0}^n x_i^2 - (\sum_{i=0}^n x_i)^2}$$

..... (3.8)

Substituyendo los valores de las ecs. (3.7) y (3.8) en la ec. (3.1), tenemos la recta que mejor relaciona los valores de x , y , y en los $n+1$ puntos tabulares:

$$F(X) = \frac{\sum_{i=0}^n y_i \sum_{i=0}^n x_i^2 - (\sum_{i=0}^n x_i y_i)(\sum_{i=0}^n x_i)}{(n+1)\sum_{i=0}^n x_i^2 - (\sum_{i=0}^n x_i)^2} + \left\{ \frac{(n+1)\sum_{i=0}^n x_i y_i - (\sum_{i=0}^n x_i)(\sum_{i=0}^n y_i)}{(n+1)\sum_{i=0}^n x_i^2 - (\sum_{i=0}^n x_i)^2} \right\} x$$

..... (3.9)

ii).- Verificar la hipótesis de linealidad de la dependencia funcional (correlación):

En un problema de correlación, la relación entre dos o más variables la proporciona el llamado "coeficiente de correlación lineal", el cual es una medida de la relación entre dos variables aleatorias, y se denota por: r .

Para determinar el coeficiente de correlación lineal, primero se selecciona una muestra aleatoria de n pares de mediciones (x, y) , y se grafican los valores, obteniendo las siguientes posibilidades:

- a).- Si los puntos caen cercanos a una recta con pendiente positiva, se tiene una correlación positiva alta entre las dos variables.
- b).- Si los puntos caen cercanos a una recta con pendiente negativa, se tiene una correlación negativa alta entre las dos variables.
- c).- Si los puntos se dispersan de una línea recta, la correlación lineal entre las dos variables es baja.
- d).- Si los puntos siguen un patrón aleatorio, la relación lineal entre las dos variables es cero.

La medida mas comúnmente utilizada de correlación lineal entre dos variables es el llamado "coeficiente de correlación de Pearson del producto de momentos" (2), o simplemente coeficiente de correlación, definido por:

$$r = \frac{(n+1) \sum_{i=0}^n x_i y_i - \left(\sum_{i=0}^n x_i \right) \left(\sum_{i=0}^n y_i \right)}{\sqrt{\left[(n+1) \sum_{i=0}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=0}^n x_i \right)^2 \right] \left[(n+1) \sum_{i=0}^n y_i^2 - \left(\sum_{i=0}^n y_i \right)^2 \right]}} \dots (3.10)$$

donde: $(n+1)$ = número de puntos (x, y)

x_i = valor de la abscisa.

y_i = valor de la ordenada.

Este coeficiente de correlación es una medida de la relación lineal que tienen las variables, y un valor de $r=0$ implica falta de linealidad, no -- falta de relación. Por ejemplo, una relación cuadrática obtendría un coeficiente de correlación cercano a cero, lo que indica, que no hay linealidad en la relación.

Para los casos donde todos los puntos caen en una línea recta, se tiene una relación perfecta y el valor de r es ± 1 .

Si r es cercano a cero la relación lineal entre las variables es mala. No debe interpretarse el valor de r más allá de lo establecido, puesto que valores de r igual a 0.3 y 0.6, significa que tenemos dos correlaciones positivas, una más fuerte que otra; pero no se puede concluir que $r=0.6$ indica una relación dos veces mayor que la que tiene un valor de $r=0.3$.

Resultados.

Como es señalado en la introducción, las diferentes escalas de electronegatividad presentan espacios en blanco, por lo que en el presente trabajo-- de tesis se han utilizado cuatro maneras diferentes para calcular las electronegatividades faltantes.

Con base en los valores de las tablas I(1) y II se determinaron las relaciones siguientes:

- 1).- Relación del número atómico Z , con los valores de electronegatividad de las escalas de Allred y Rochow, Armas-Esparza, Gordy, Mulliken, Pauling y Sanderson.
- 2).- Relación del número atómico Z , con el logaritmo natural de los valores de electronegatividad de los autores antes mencionados.
- 3).- Relación de los valores de electronegatividad de Armas-Esparza, con los valores de electronegatividad de Allred y Rochow, Gordy, Mulliken, Pauling y Sanderson.
- 4).- Relación del logaritmo natural de los valores de electronegatividad de Armas-Esparza, con los logaritmos naturales de

electronegatividad de los autores antes -
mencionados.

T A B L A I

<u>Z</u>	<u>x_A</u>	<u>x_{OMV}</u>	<u>x_G</u>	<u>x_M</u>	<u>x_P</u>	<u>x_S</u>
03	00.970	00.508	00.900	00.840	00.980	00.860
04	01.470	01.768	01.300	01.400	01.570	01.610
05	02.010	04.021	02.000	01.930	02.040	01.880
06	02.500	08.378	01.800	02.480	02.550	02.470
07	03.040	14.174		02.280	03.040	02.930
08	03.500	22.181		03.040	03.440	03.460
09	04.100	32.702		03.900	03.980	03.920
10	05.100	45.957				04.380
11	01.010	00.855	00.900	00.740	00.930	00.850
12	01.230	02.022	01.400	01.170	01.310	01.420
13	01.470	02.362	01.500	01.640	01.610	01.540
14	01.740	03.757	01.700	02.250	01.900	01.740
15	02.050	05.786		01.840	02.190	02.160
16	02.440	08.355		02.280	02.580	02.660
17	02.830	11.640		02.950	03.150	03.280
18	03.300	15.575				03.320
19	00.910	00.748	00.800	00.770	00.820	00.740
20	01.040	01.784	01.100	00.990	01.000	01.060
21	01.200	01.879		01.580	01.360	01.090
22	01.320	02.208	01.700	01.320	01.540	01.130
23	01.450	02.538	01.700	01.190	01.630	01.240
24	01.560	02.430	01.800	02.720	01.660	01.350
25	01.600	03.235	01.600	01.290	01.550	01.440
26	01.640	03.609	01.800	01.380	01.830	01.470
27	01.700	03.998	01.700	01.960	01.830	
28	01.750	04.402	02.000		01.910	
29	01.750	04.119	01.800	01.360	01.900	01.140
30	01.660	05.259	01.500	01.490	01.650	01.860
31	01.820	03.956	01.600	01.820	01.810	02.100
32	02.020	05.707	01.900	02.500	02.010	02.310
33	02.180	07.434	02.100	02.580	02.180	02.530

Z	x_A	x_{OMV}	x_G	x_M	x_P	x_S
34	02.480	09.834	01.900	02.180	02.550	02.760
35	02.740	12.470		02.620	02.960	02.960
36	03.100	15.457			02.900	03.470
37	00.890	00.953	00.800	00.500	00.820	00.700
38	00.990	01.801	00.900	00.850	00.950	00.960
39	01.110	02.183			01.220	00.980
40	01.220	02.540	01.500		01.330	01.000
41	01.230	02.652	01.600		01.600	01.120
42	01.300	03.019	01.700		02.160	01.240
43	01.370	03.735			01.900	01.330
44	01.420	03.748	01.800		02.200	01.400
45	01.450	04.180	01.900		02.280	01.470
46	01.350		02.000		02.200	01.570
47	01.420	04.855	01.700	01.360	01.930	01.720
48	01.460	05.844	01.600	01.400	01.690	01.730
49	01.490	04.435		01.570	01.780	01.880
50	01.720	05.920	01.700	02.440	01.960	01.580
51	01.810	07.023	01.700	02.640	02.050	02.190
52	02.010	08.757	01.900	02.080	02.100	02.340
53	02.210	10.660		02.520	02.660	02.500
54	02.400	12.780			02.600	02.630
55	00.860	01.004	00.700		00.790	00.690
56	00.970	01.788	00.900		00.890	00.930
57	01.080	02.539	01.300		01.100	00.920
58	01.080	02.759	01.000		01.120	00.920
59	01.070	02.054	01.000		01.130	00.920
60	01.070	02.546	01.300		01.140	00.930
61	01.070	02.652				00.940
62	01.070	02.331	01.300		01.170	00.940
63	01.010	02.435				00.940
64	01.110	02.799			01.200	00.940
65	01.100	02.634				00.940
66	01.100	02.829			01.220	00.940
67	01.100	02.829			01.230	00.960
68	01.110	02.923			01.240	00.960
69	01.110	03.038			01.250	00.960
70	01.060	03.126				00.960
71	01.140	03.650			01.270	03.960
72	01.230	04.209	01.400		01.300	00.980

Z	x_A	x_{OMV}	x_G	x_M	x_P	x_S
73	01.330	04.771	01.700		01.500	01.040
74	01.400	05.329	01.800		02.360	01.130
75	01.460	05.898	02.100		01.900	01.190
76	01.520	06.441	01.900		02.200	01.260
77	01.550	07.018	01.900		02.200	01.330
78	01.440	07.212	02.200		02.280	01.360
79	01.420	07.763	01.900	01.780	02.540	01.720
80	01.440	08.777	01.800	01.940	02.000	01.920
81	01.440	07.043	01.500		01.620	01.360
82	01.550	08.395	01.600		02.330	01.610
83	01.670	07.954	01.700		02.020	02.060
84	01.760	09.681			02.000	
85	01.900	11.550			02.200	
86		13.530				

T A B L A II

Z	$\ln x_A$	$\ln x_{OMV}$	$\ln x_G$	$\ln x_M$	$\ln x_P$	$\ln x_S$
03	-0.6304	-0.6772	-0.1053	-0.1743	-0.0202	-0.1508
04	00.3852	00.5698	00.2623	00.3364	00.4510	00.4762
05	00.6981	01.3915	00.6931	00.6575	00.7129	00.6312
06	00.9162	02.1256	00.5877	00.9082	00.9360	00.9042
07	01.1118	02.6514		00.8241	01.1118	01.0750
08	01.2527	03.0992		01.1118	01.2354	01.2412
09	01.4109	03.4874		01.3609	01.3812	01.3660
10	01.6292	03.8277				01.4770
11	00.0099	-0.1566	-0.1053	-0.3011	-0.0725	-0.1625
12	00.2070	00.7040	00.3364	00.1570	00.2700	00.3506
13	00.3852	00.8595	00.4054	00.4946	00.4762	00.4317
14	00.5538	01.3236	00.5306	00.8109	00.6418	00.5538
15	00.7178	01.7554		00.6097	00.7839	00.7701
16	00.8919	02.1228		00.8241	00.9477	00.9783
17	01.0402	02.4544		01.0818	01.1505	01.1878

Z	$\ln x_A$	$\ln x_{OMV}$	$\ln x_G$	$\ln x_M$	$\ln x_P$	$\ln x_S$
18	01.1939	02.7456				01.3660
19	-0.0943	-0.2903	-0.2231	-0.2613	-0.1984	-0.3011
20	00.0392	00.5788	-0.0953	-0.0100	00.0000	00.0582
21	00.1823	00.6307		00.4574	00.3074	00.0861
22	00.2776	00.7920	00.5306	00.2776	00.4317	00.1222
23	00.3715	00.9313	00.5306	00.1739	00.4885	00.2151
24	00.4446	00.8878	00.5877	01.0006	00.5068	00.3001
25	00.4700	01.1740	00.4700	00.2546	00.4382	00.3646
26	00.4946	01.2834	00.5877	00.3220	00.6043	00.3852
27	00.5306	01.3857	00.5306	00.5729	00.6312	
28	00.5596	01.4820	00.6931		00.6471	
29	00.5596	01.4156	00.5877	00.3074	00.6418	00.1310
30	00.5068	01.6599	00.4054	00.3987	00.5007	00.6205
31	00.5988	01.3752	00.4700	00.5988	00.5933	00.7419
32	00.7030	01.7416	00.6418	00.9162	00.6981	00.8372
33	00.7793	02.0060	00.7419	00.9477	00.7793	00.9282
34	00.9082	02.2858	00.6418	00.7793	00.9360	01.0152
35	01.0079	02.5233		00.9631	01.0851	01.0851
36	01.1314	02.7380			01.0647	01.2441
37	-0.1165	-0.0481	-0.2231	-0.6931	-0.1984	-0.3566
38	-0.0100	00.5883	-0.1053	-0.1625	-0.0512	-0.0408
39	00.1043	00.7807			00.1988	-0.0202
40	00.1988	00.9321	00.4054		00.2851	00.0000
41	00.2070	00.9753	00.4700		00.4700	00.1133
42	00.2623	01.1049	00.5306		00.7701	00.2151
43	00.3506	01.3177			00.6418	00.2851
44	00.3506	01.3212	00.5877		00.7884	00.3364
45	00.3715	01.4129	00.6418		00.8241	00.3852
46	00.3001		00.6931		00.7884	00.4510
47	00.3506	01.5800	00.5306	00.3074	00.6575	00.5423
48	00.3784	01.7654	00.4700	00.3364	00.5247	00.5481
49	00.3987	01.4895		00.4510	00.5766	00.6312
50	00.5423	01.7783	00.5306	00.8919	00.6729	00.4574
51	00.5933	01.9491	00.5306	00.9707	00.7178	00.7839
52	00.6981	02.1698	00.6418	00.7419	00.7419	00.8501
53	00.7929	02.3664		00.9242	00.9783	00.9162
54	00.8754	02.5478			00.9555	00.9669
55	-0.1508	00.0039	-0.3566		-0.2357	-0.3710

Z	$\ln x_A$	$\ln x_{OMV}$	$\ln x_G$	$\ln x_M$	$\ln x_P$	$\ln x_S$
56	-0.0304	00.5810	-0.1053		-0.1165	-0.0725
57	00.0725	00.9317	00.2623		-0.0953	-0.0833
58	00.0769	01.0148	00.0000		00.1133	-0.0833
59	00.0676	00.7197	00.0000		00.1222	-0.0833
60	00.0676	00.9345	00.2623		00.1310	-0.0725
61	00.0676	00.9753				-0.0618
62	00.0676	00.8462	00.2623		00.1570	-0.0618
63	00.0099	00.8899				-0.0618
64	00.1043	01.0292			00.1823	-0.0618
65	00.0953	00.9685				-0.0618
66	00.0953	01.0021			00.1988	-0.0618
67	00.0953	01.0399			00.2070	-0.0618
68	00.1043	01.0726			00.2151	-0.0618
69	00.1043	01.1111			00.2231	-0.0618
70	00.0582	01.1397				-0.0618
71	00.1310	01.3947			00.2390	-0.0618
72	00.2070	01.4372	00.3364		00.2623	-0.0202
73	00.2851	01.5625	00.5306		00.4055	-0.0392
74	00.3364	01.6731	00.5877		00.8586	00.1222
75	00.3784	01.7746	00.7419		00.6418	00.1739
76	00.4187	01.8626	00.6418		00.7884	00.2311
77	00.4382	01.9484	00.6418		00.7844	00.2851
78	00.3646	01.9484	00.7884		00.8241	00.3074
79	00.3506	02.0493	00.6418	00.5766	00.9321	00.5423
80	00.3646	02.1721	00.5877	00.6626	00.6931	00.6523
81	00.3646	01.9520	00.4054		00.4824	00.3074
82	00.4382	02.1276	00.4700		00.8458	00.4762
83	00.5128	02.0736	00.5306		00.7030	00.7227
84	00.5653	02.2701			00.6931	
85	00.6418	02.4466			00.7884	
86		02.6049				

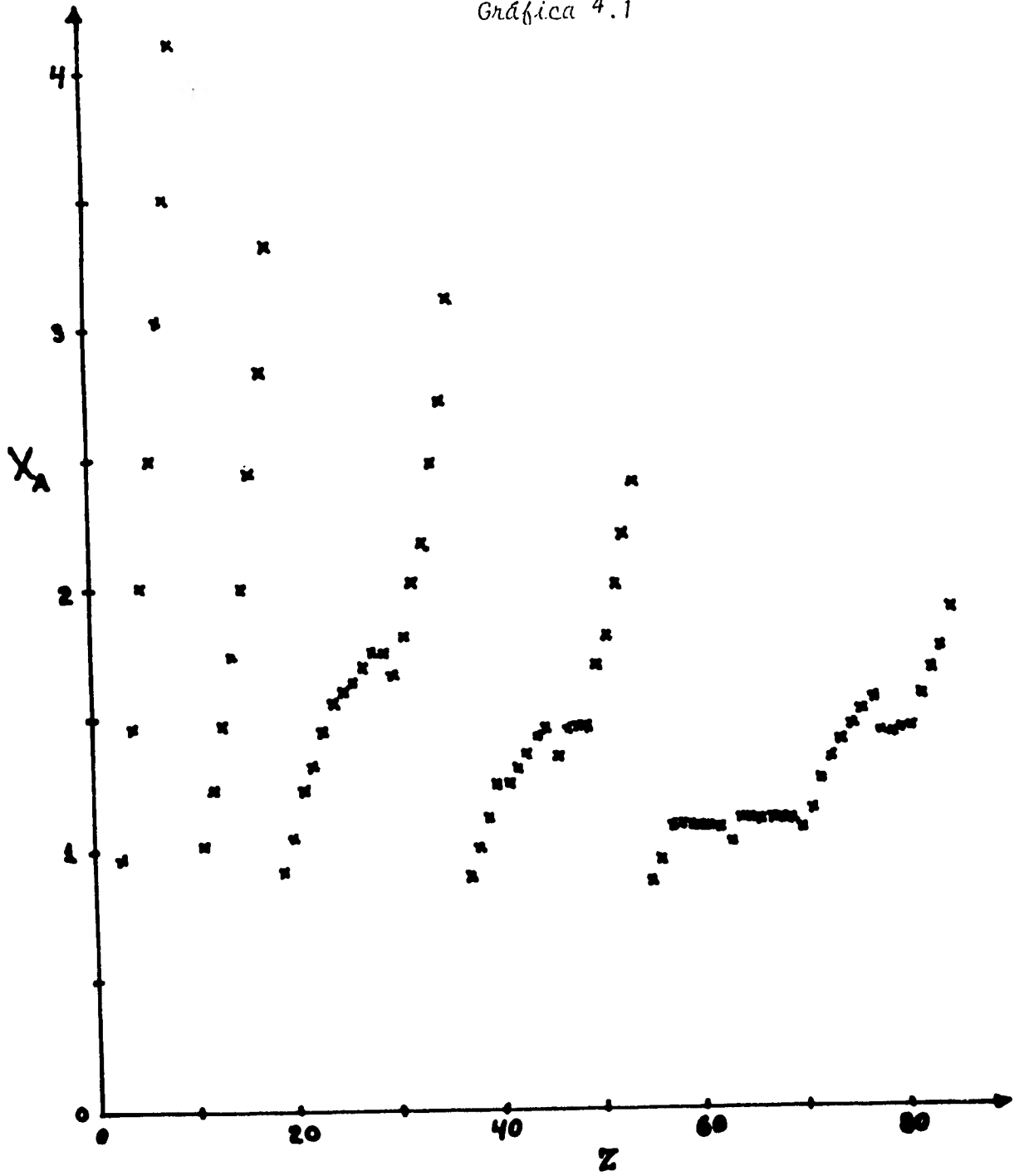
1).- Relación del número atómico z , con los valores de electronegatividad de las escalas de Allred Rochow, Armas-Esparza, Gordy, Mulliken, Pauling y Sanderson:

Se elaboraron las gráficas del número atómico Z versus electronegatividad de los autores arriba mencionados, obteniéndose las gráficas 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, 4.5 y 4.6. Se observa en todas ellas un comportamiento similar, con valores de electronegatividad que varían de un mínimo al iniciar un período de elementos ($Z=3, 11, 19, 37, 55$) a un valor máximo al terminar el período ($Z=10, 18, 36, 54$ y 86). La linealidad que se presenta es por períodos de elementos.

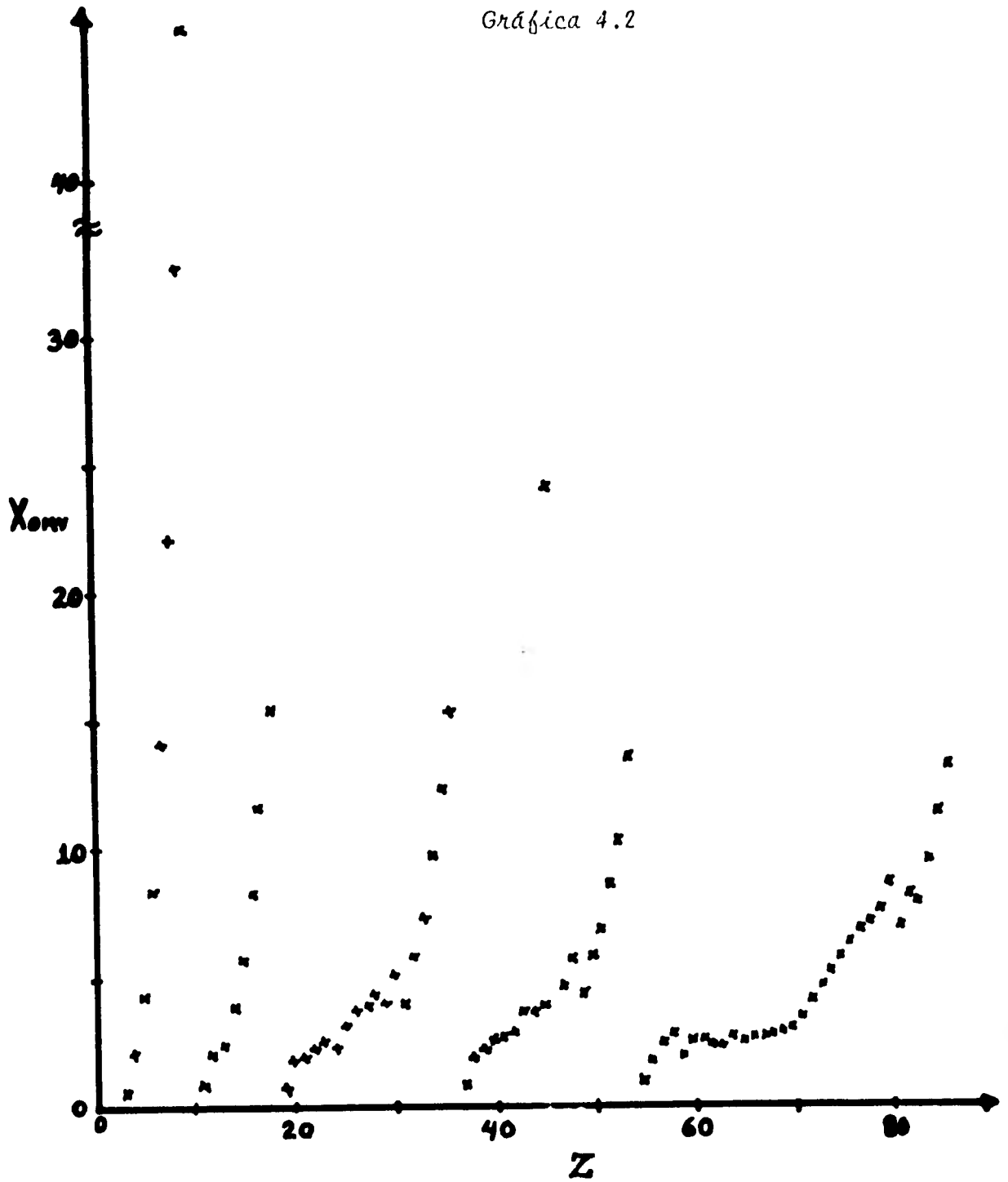
Posteriormente se procedió a calcular el coeficiente de correlación y la ecuación de correlación lineal por períodos, para cada uno de los autores, utilizando el método de mínimos cuadrados descrito anteriormente. Los resultados se muestran en la tabla III.

Una vez obtenida la ecuación de correlación, se alimentó el valor de Z y se calculó el valor de electronegatividad de aquellos elementos donde las escalas de los autores no señalan valor alguno de

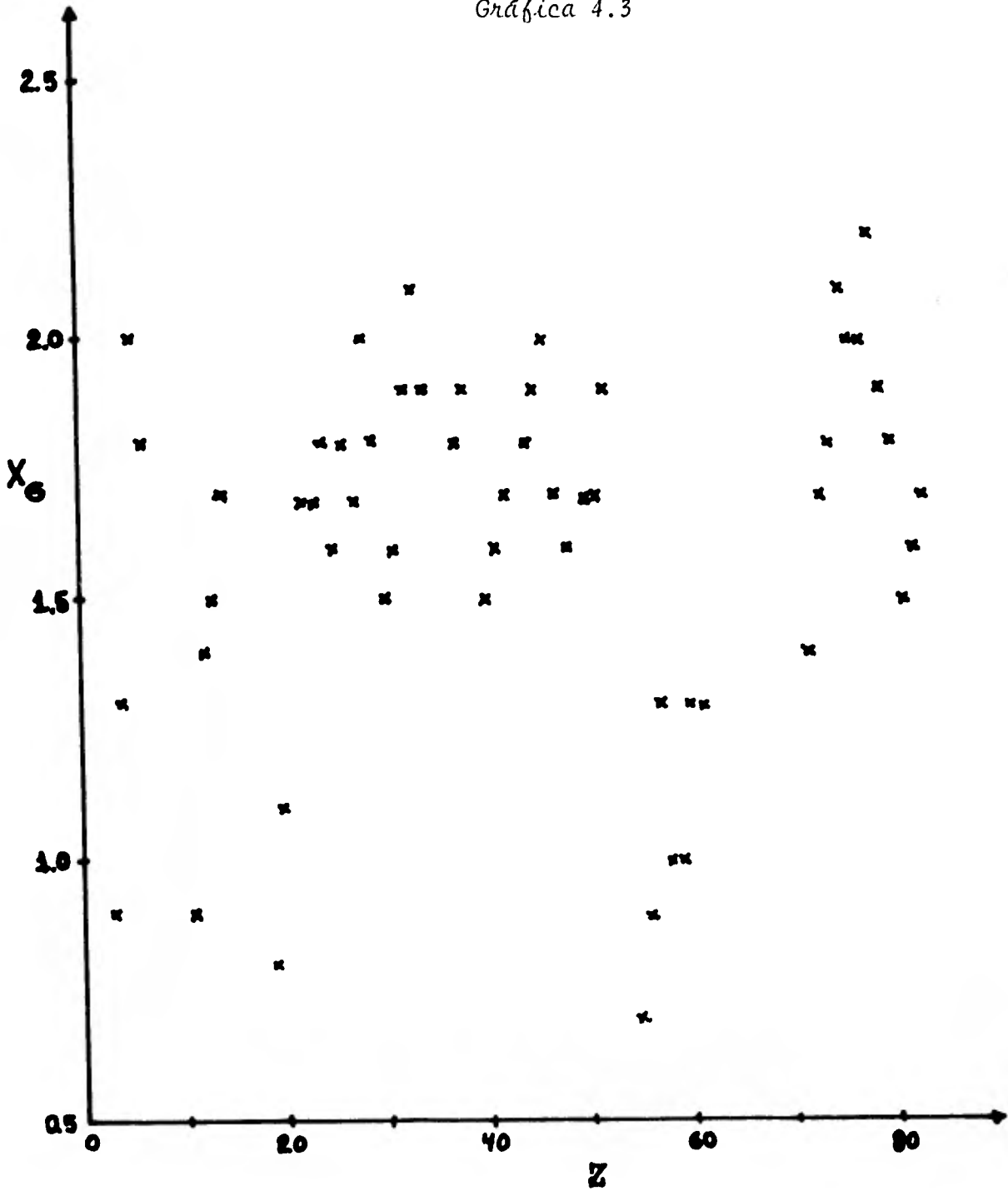
Gráfica 4.1



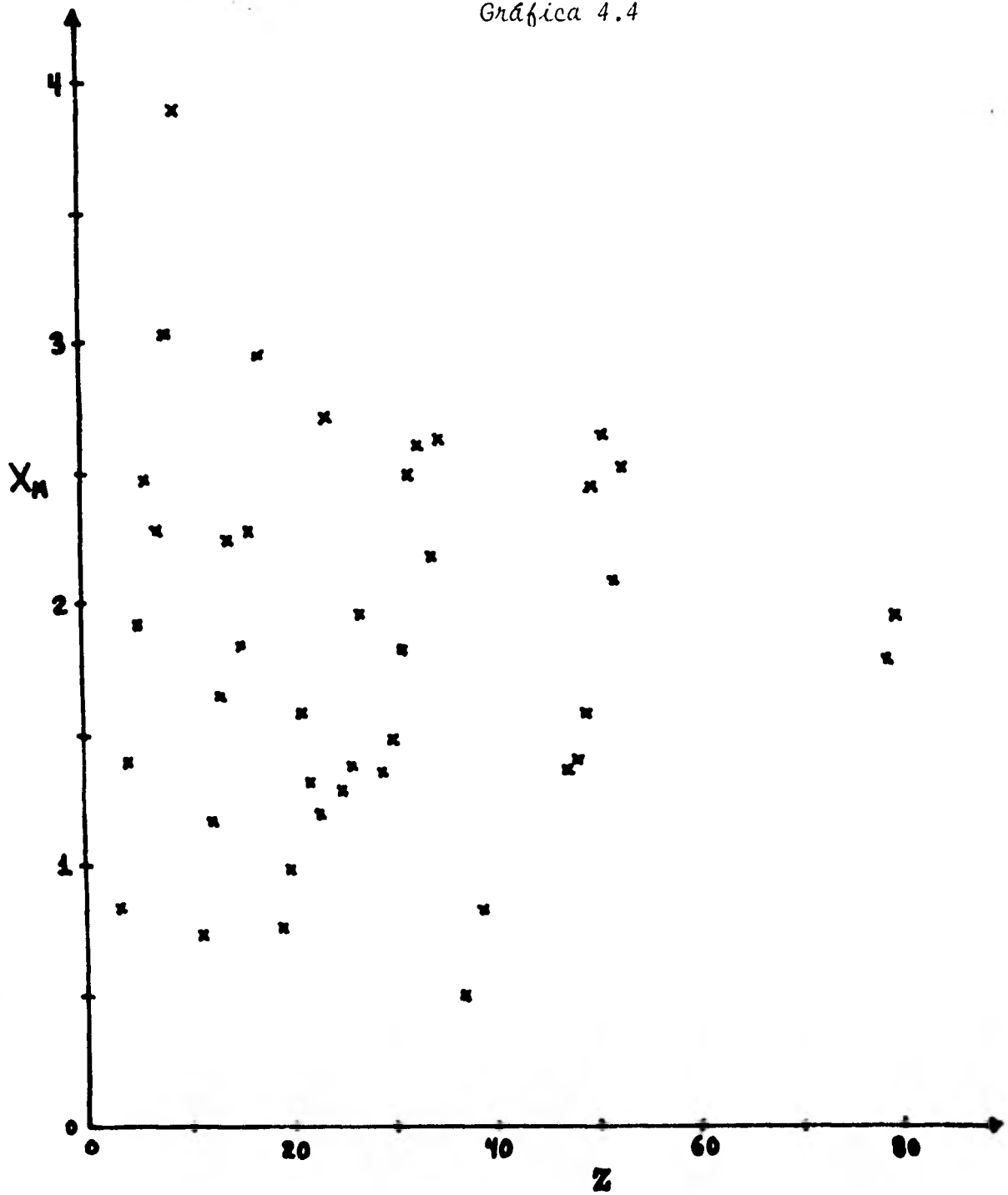
Gráfica 4.2



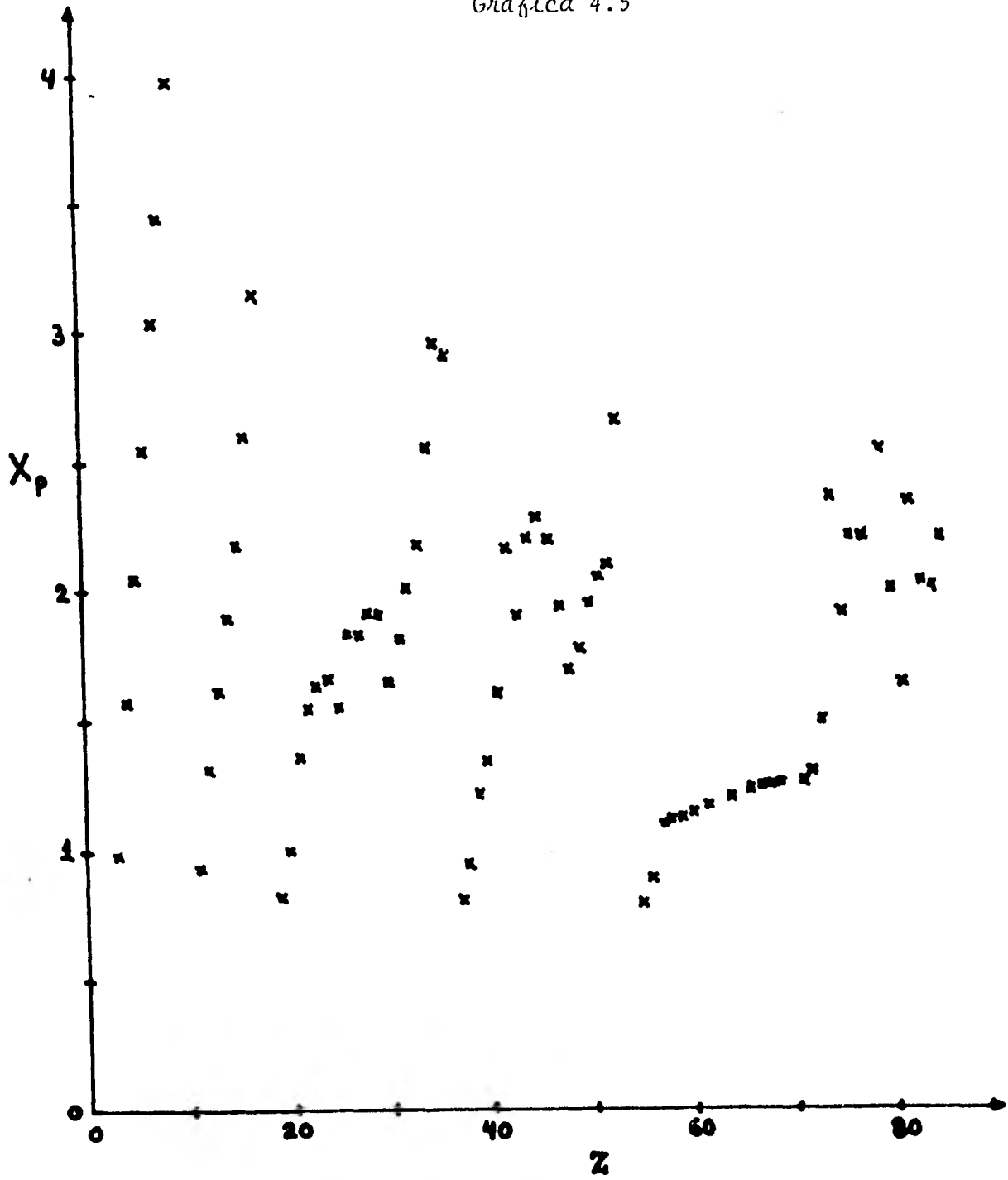
Gráfica 4.3



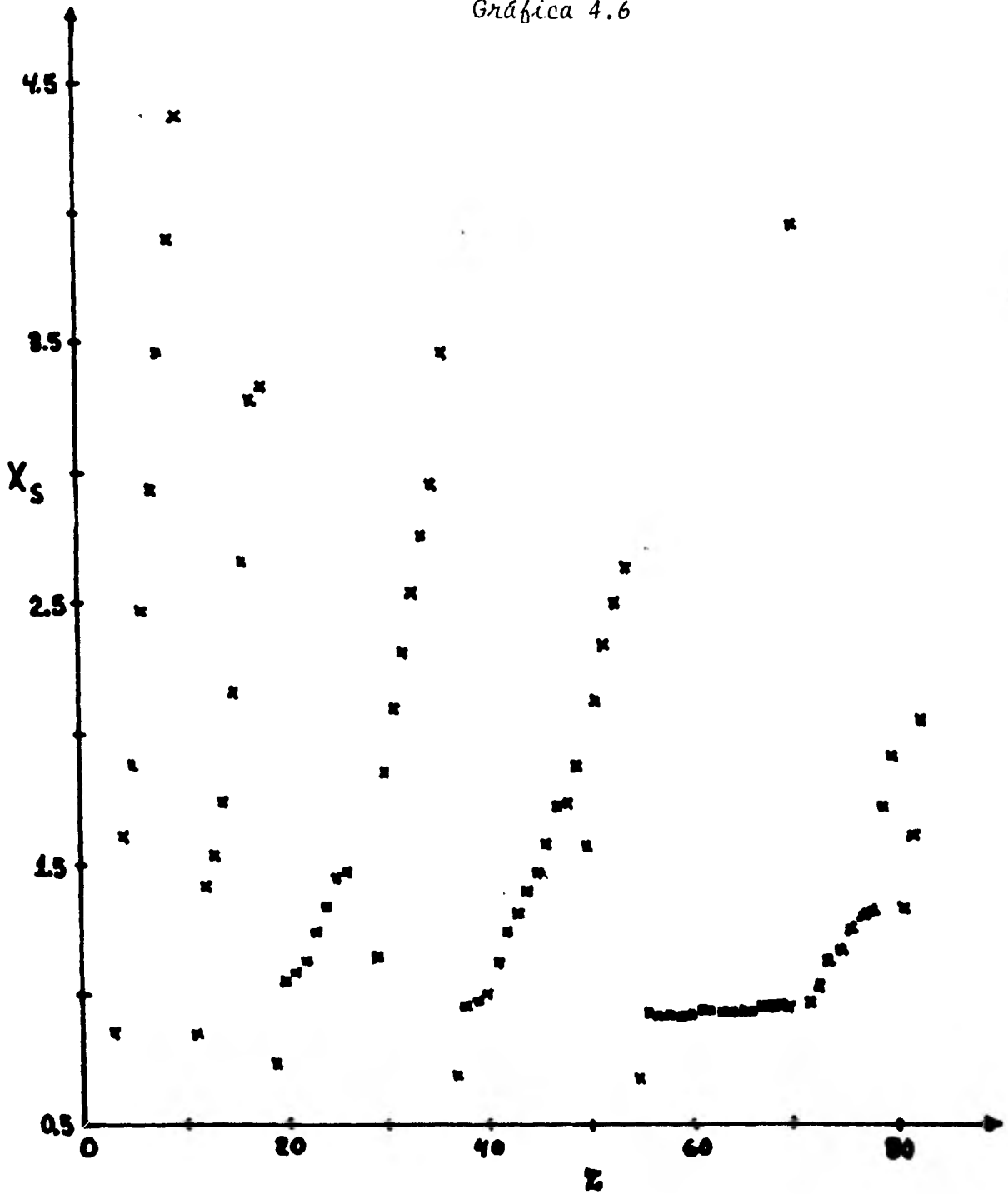
Gráfica 4.4



Gráfica 4.5



Gráfica 4.6



A U T O R	P E R I O D O									
	3 - 10	r	11 - 18	r	19 - 36	r	37 - 54	r	55 - 86	r
ALLRED - RUCHOW	$X_A = 0.5603z - 0.8060$	0.99	$X_A = 0.3244z - 2.6951$	0.99	$X_A = 0.0995z - 0.9641$	0.93	$X_A = 0.0704z - 1.7159$	0.93	$X_A = 0.0358z - 0.5427$	0.91
AKMAJ - EFARZA	$X_{OMV} = 6.3462z - 25.0398$	0.95	$X_{OMV} = 2.0373z - 23.2476$	0.96	$X_{OMV} = 0.6424z - 12.5071$	0.87	$X_{OMV} = 0.5398z - 19.5452$	0.92	$X_{OMV} = 0.3060z - 16.5929$	0.92
GORDY	$X_G = 0.3400z - 0.0300$	0.88	$X_G = 0.2500z - 1.7500$	0.94	$X_G = 0.0501z - 0.3192$	0.70	$X_G = 0.0526z - 0.7532$	0.71	$X_G = 0.0117z - 0.9178$	0.82
MULLIKEN	$X_M = 0.4575z - 0.4778$	0.97	$X_M = 0.3232z - 2.6864$	0.94	$X_M = 0.0844z - 0.5397$	0.70	$X_M = 0.1173z - 3.8365$	0.89		
PAULING	$X_P = 0.4907z - 0.4300$	0.99	$X_P = 0.3492z - 2.9371$	0.99	$X_P = 0.0954z - 0.7876$	0.91	$X_P = 0.0762z - 1.6132$	0.79	$X_P = 0.0483z - 1.8247$	0.86
SANDERSON	$X_S = 0.4927z - 0.5140$	0.99	$X_S = 0.3115z - 3.1211$	0.98	$X_S = 0.1450z - 2.1270$	0.93	$X_S = 0.1015z - 3.4411$	0.96	$X_S = 0.0347z - 1.1649$	0.47

r = Coeficiente de correlación

z = Número atómico

X = Electronegatividad

electronegatividad. los resultados se muestran en-
la tabla IV

T A B L A I V

<u>Z</u>	<u>x_A</u>	<u>x_{OMV}</u>	<u>x_G</u>	<u>x_M</u>	<u>x_P</u>	<u>x_S</u>
07			2.350			
08			2.690			
09			3.030			
10			3.370	4.097	4.477	
15			2.000			
16			2.250			
17			2.500			
18			2.750	3.131	3.350	
21			1.372			
27						1.790
28				1.808		1.935
35			2.074			
36			2.124	2.458		
39			1.300	0.741		
40				0.858		
41				0.976		
42				1.093		
43			1.510	1.211		
44				1.328		
45				1.445		
46		5.286		1.563		
49			1.826			
53			2.037			
54			2.090	2.502		
61			1.200		1.170	
63			1.270		1.215	
64			1.305			
65			1.339			
66			1.374			
67			1.409			
68			1.444			
69			1.478			
70			1.513		1.558	
71			1.548			
84			1.999			1.752
85			2.034			1.787
86	1.678		2.069		2.341	1.821

2).- Relación del número atómico z , con el logaritmo natural de los valores de electronegatividad de los autores antes mencionados.

Con el objeto de encontrar otras relaciones líneales y poder compararlas con las mostradas en la tabla III, se supone un comportamiento exponencial del tipo:

$$x = e^{mz+b} \dots\dots\dots (4.1)$$

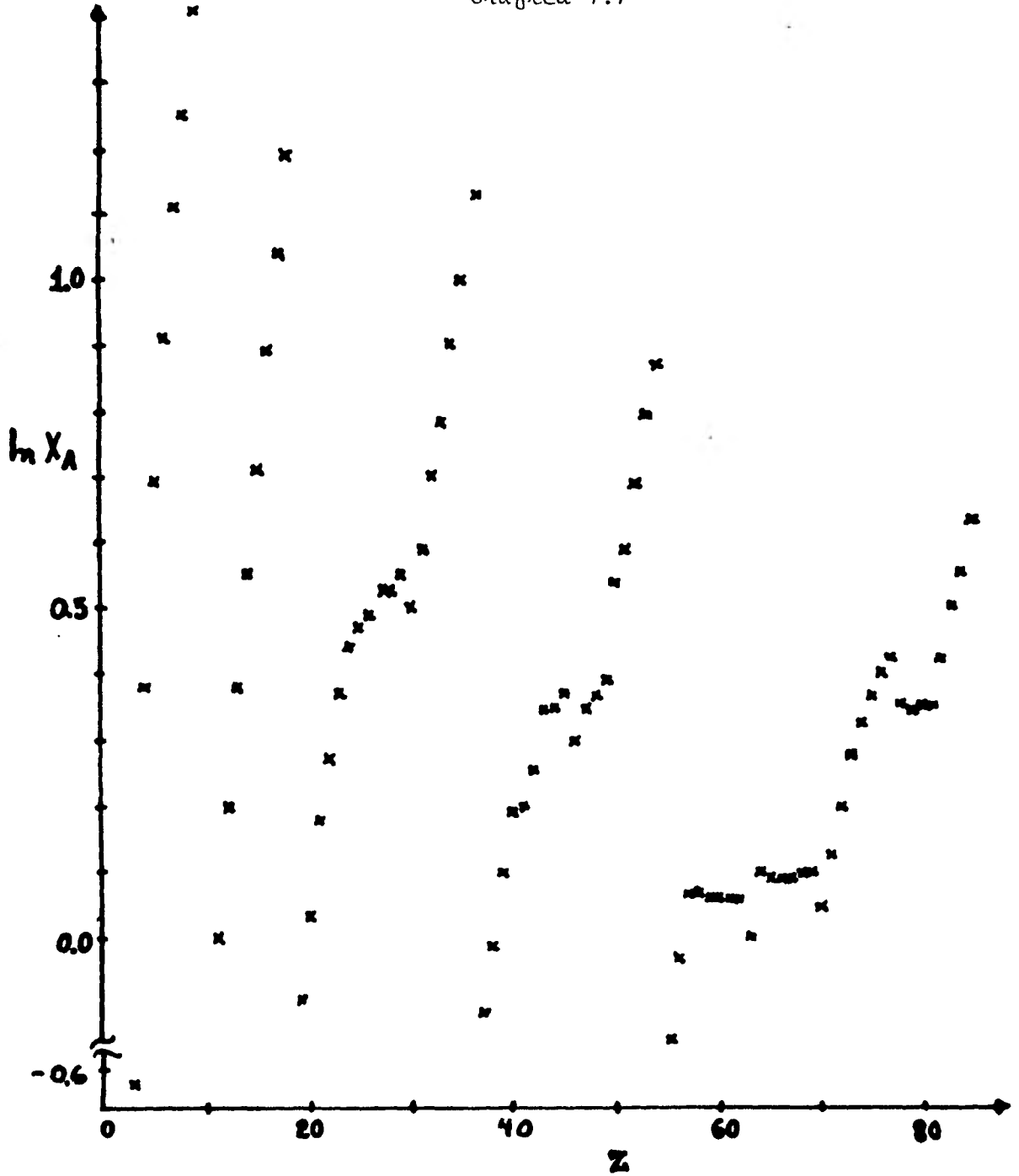
obteniendo el logaritmo natural resulta:

$$\ln x = mz + b \dots\dots\dots (4.2)$$

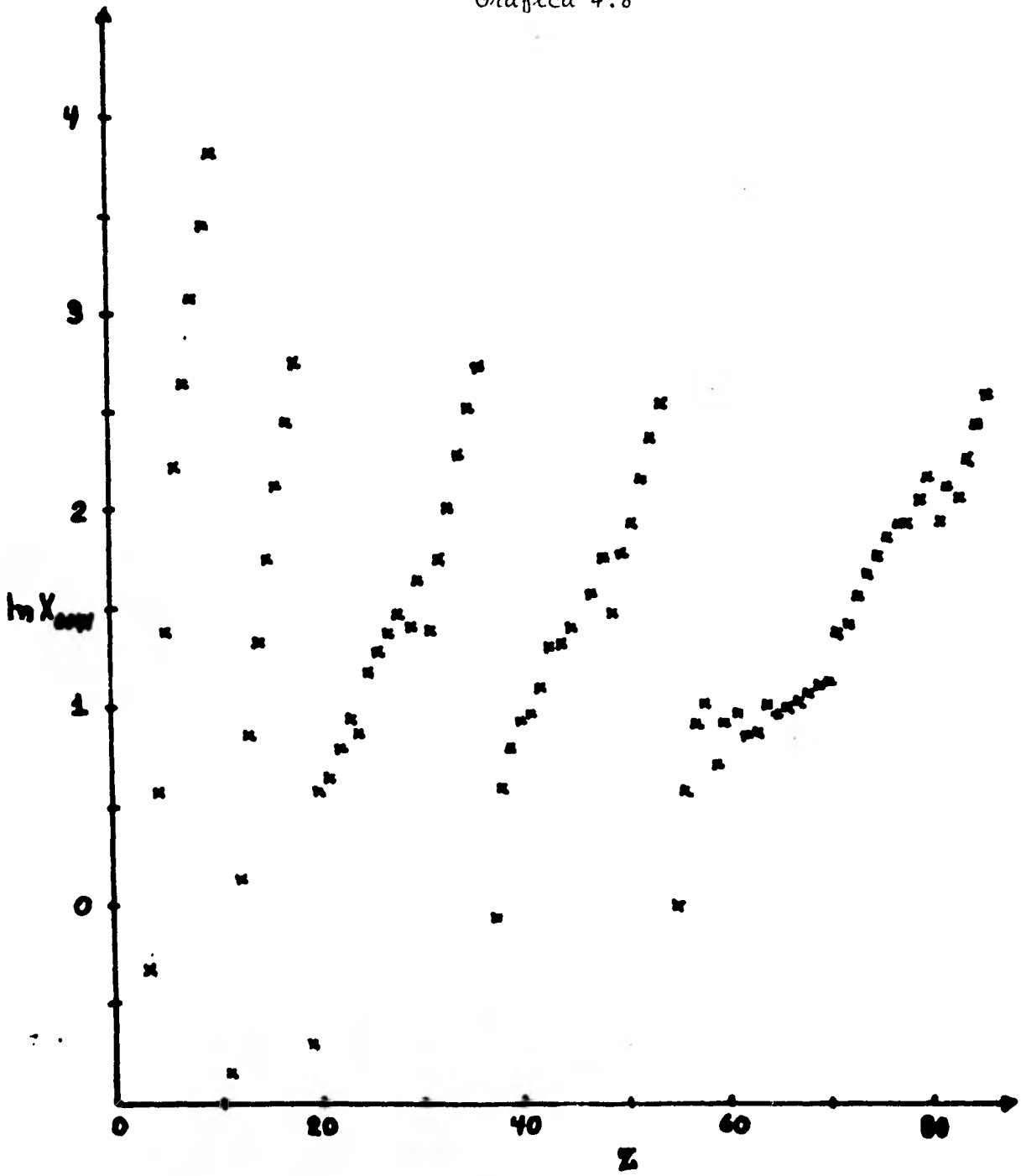
por lo que, al graficar Z versus logaritmo natural de x deben obtenerse relaciones lineales (por periodos de elementos), como lo muestran las gráficas -- 4.7, 4.8, 4.9, 4.10, 4.11 y 4.12

Posteriormente, se procedió a calcular el coeficiente y las ecuaciones de correlación lineal por periodos de elementos (tabla V), y se calcularon -- los valores de electronegatividad, para los elementos que no la tienen, en las diferentes escalas. -- Los resultados se presentan en la tabla VI.

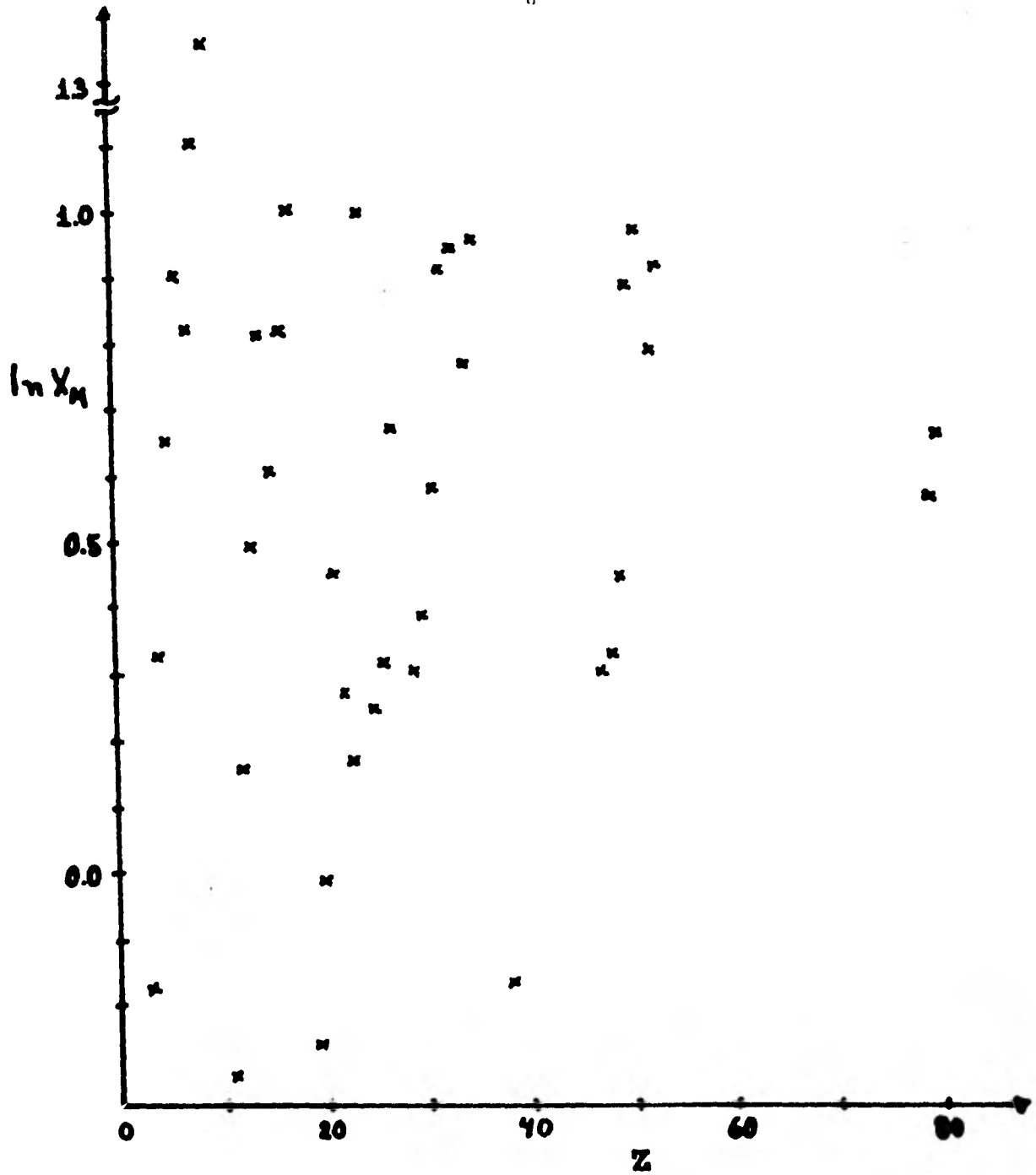
Gráfica 4.7



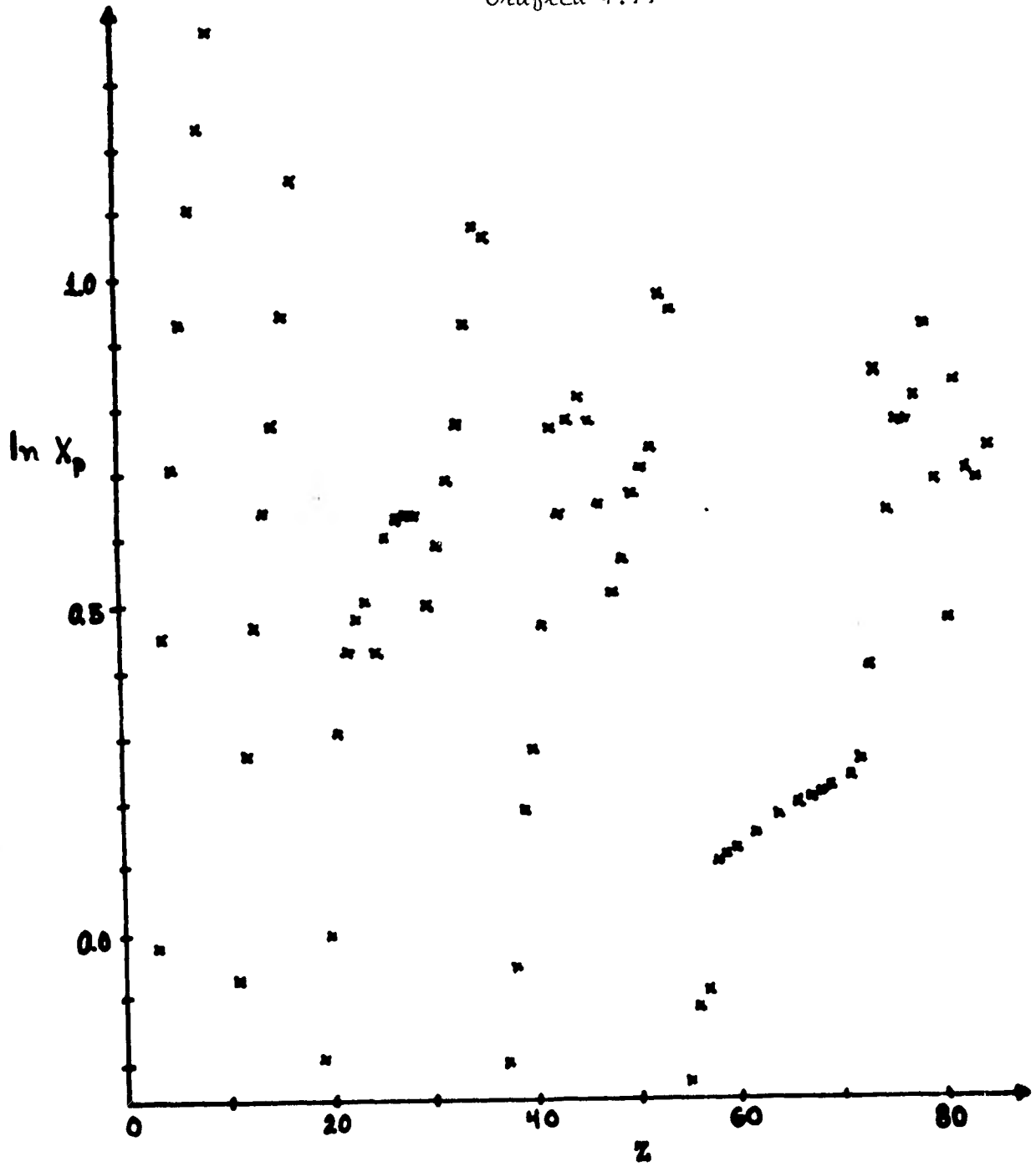
Gnáfica 4.8



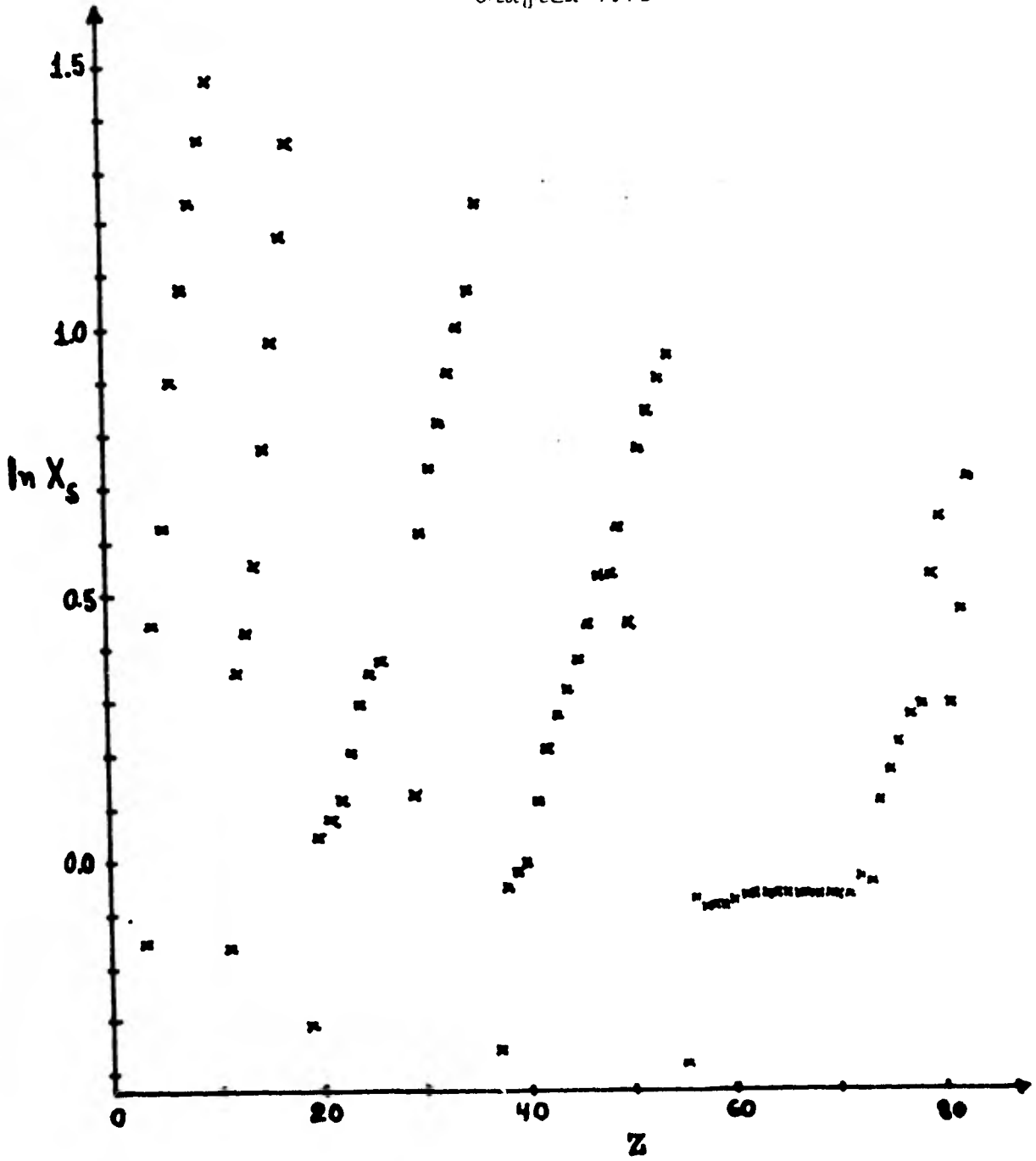
Gráfica 4.10



Gráfica 4.11



Gráfica 4.12



AUTOR	P E R I O D O									
	3 - 10	r	11 - 18	r	19 - 36	r	37 - 54	r	55 - 86	r
ALFRED - ROCHOW	$\text{Ln } X_A = 0.2714z - 0.9179$	0.92	$\text{Ln } X_A = 0.1683z - 1.8175$	0.99	$\text{Ln } X_A = 0.0565z - 1.0288$	0.95	$\text{Ln } X_A = 0.0464z - 1.7439$	0.95	$\text{Ln } X_A = 0.0199z - 1.1795$	0.93
ARMAS - ESPANZA	$\text{Ln } X_{OHV} = 0.6163z - 1.9467$	0.97	$\text{Ln } X_{OHV} = 0.3963z - 4.2703$	0.98	$\text{Ln } X_{OHV} = 0.1332z - 2.2983$	0.95	$\text{Ln } X_{OHV} = 0.1166z - 3.8912$	0.96	$\text{Ln } X_{OHV} = 0.0635z - 3.0613$	0.96
GORDY	$\text{Ln } X_G = 0.2510z - 0.7701$	0.89	$\text{Ln } X_G = 0.1976z - 2.1793$	0.92	$\text{Ln } X_G = 0.0404z - 0.6136$	0.69	$\text{Ln } X_G = 0.0407z - 1.3823$	0.71	$\text{Ln } X_G = 0.0259z - 1.4476$	0.84
MULLIKEN	$\text{Ln } X_M = 0.2258z - 0.6371$	0.95	$\text{Ln } X_M = 0.1999z - 2.2737$	0.92	$\text{Ln } X_M = 0.0531z - 0.9438$	0.74	$\text{Ln } X_M = 0.0906z - 3.8607$	0.94		
PAULING	$\text{Ln } X_P = 0.2204z - 0.4928$	0.97	$\text{Ln } X_P = 0.1904z - 2.0666$	0.99	$\text{Ln } X_P = 0.0531z - 0.9307$	0.90	$\text{Ln } X_P = 0.0478z - 1.6012$	0.78	$\text{Ln } X_P = 0.0330z - 1.9291$	0.90
SANDERSON	$\text{Ln } X_S = 0.2124z - 0.5033$	0.96	$\text{Ln } X_S = 0.1993z - 2.2054$	0.98	$\text{Ln } X_S = 0.0742z - 1.1050$	0.94	$\text{Ln } X_S = 0.0666z - 2.6504$	0.97	$\text{Ln } X_S = 0.0257z - 1.6973$	0.84

r= Coeficiente de correlación

z= Número atómico

Ln X= Logaritmo natural de la electronegatividad

T A B L A VI

<u>Z</u>	<u>x_A</u>	<u>x_{OMV}</u>	<u>x_G</u>	<u>x_M</u>	<u>x_P</u>	<u>x_S</u>
07			2.683			
08			3.448			
09			4.432			
10			5.697	5.059	5.537	
15			2.194			
16			2.674			
17			3.258			
18			3.971	3.762	3.902	
21			1.266			
27						1.572
28				1.722		1.693
35			2.230			
36			2.323	2.635		
39			1.229	0.721		
40				0.789		
41				0.864		
42				0.946		
43			1.447	1.036		
44				1.135		
45				1.242		
46		4.372		1.360		
49			1.848			
53			2.164	2.565		
54			2.265	2.809		
61			1.146		1.089	
63			1.208		1.164	
64			1.239			
65			1.272		1.243	
66			1.306			
67			1.340			
68			1.375			
69			1.411			
70			1.449		1.467	
71			1.487			
84			2.084			1.593
85			2.139			1.635
86	1.708		2.195		2.489	1.678

3).- Relación de los valores de electronegatividad de Armas-Esparza, con los valores de electronegatividad de Allred y Rochow, Gordy, Mulliken, Pauling y Sanderson.

Debido a que se observa en las gráficas 4.1, -- 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, y 4.6 "cierta linealidad" en los periodos, se elaboraron, a manera de ejemplo, las gráficas x_{OMV} versus x_A enumeradas del 4.13 a 4.17

El razonamiento usado fue: para el autor 1 la ecuación lineal que relaciona, por periodos de elementos, los valores de electronegatividad x_1 con el número atómico Z :

$$x_1 = m_1 Z + b_1 \dots\dots\dots (4.3)$$

de manera similar, para el autor 2 :

$$x_2 = m_2 Z + b_2 \dots\dots\dots (4.4)$$

Despejando Z de la ecuación (4.3) :

$$Z = \frac{x_1 - b_1}{m_1} \dots\dots\dots (4.5)$$

Substituyendo (4.5) en (4.4) :

$$x_2 = \frac{m_2}{m_1} x_1 - \frac{m_2}{m_1} b_1 + b_2 \dots\dots\dots (4.6)$$

como m_1 , m_2 , b_1 y b_2 son constantes:

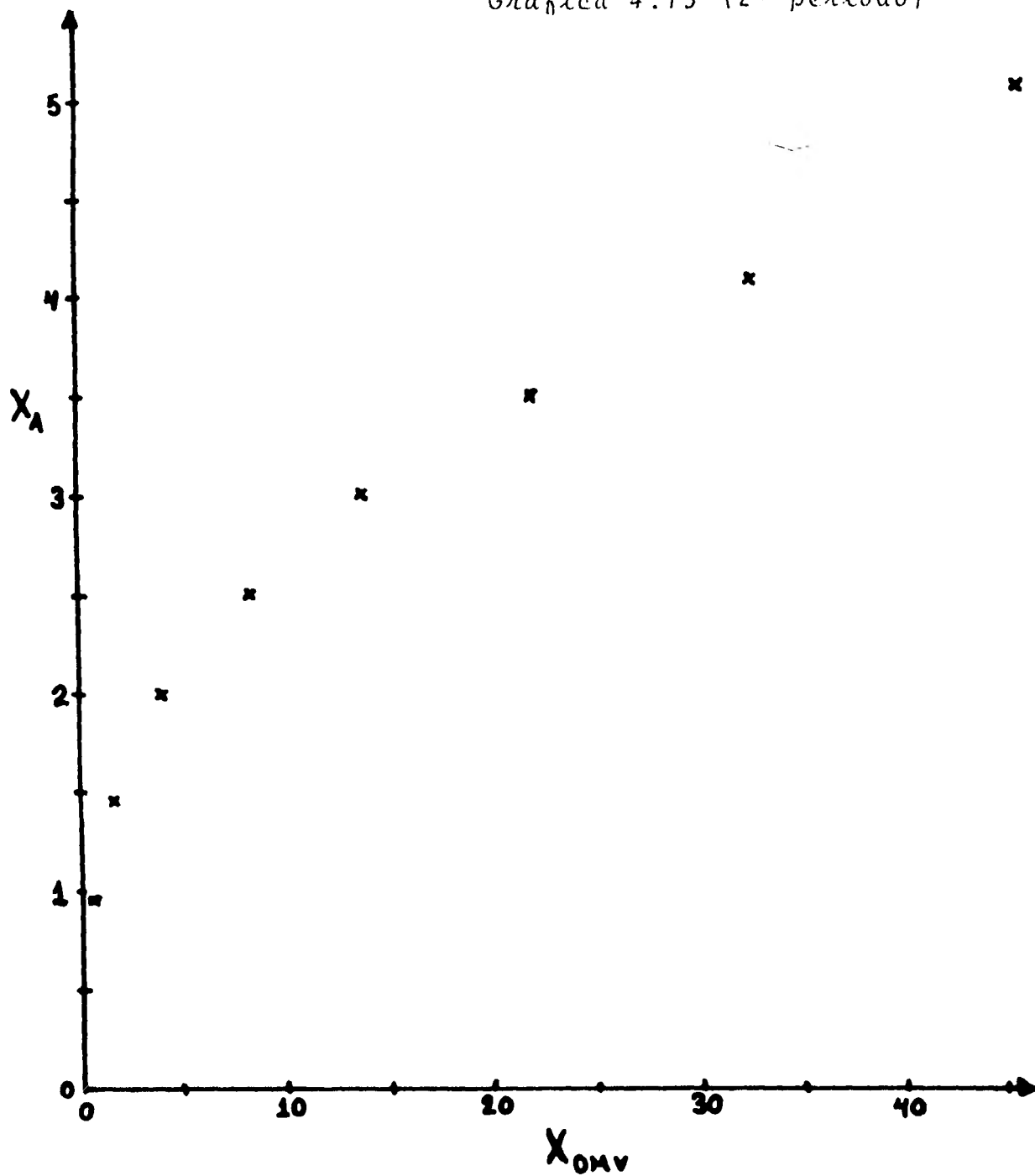
$$x_2 = mx_1 + c \dots\dots\dots (4.7)$$

La ecuación (4.7) nos indica que las gráficas x_1 versus x_2 deben ser líneas rectas.

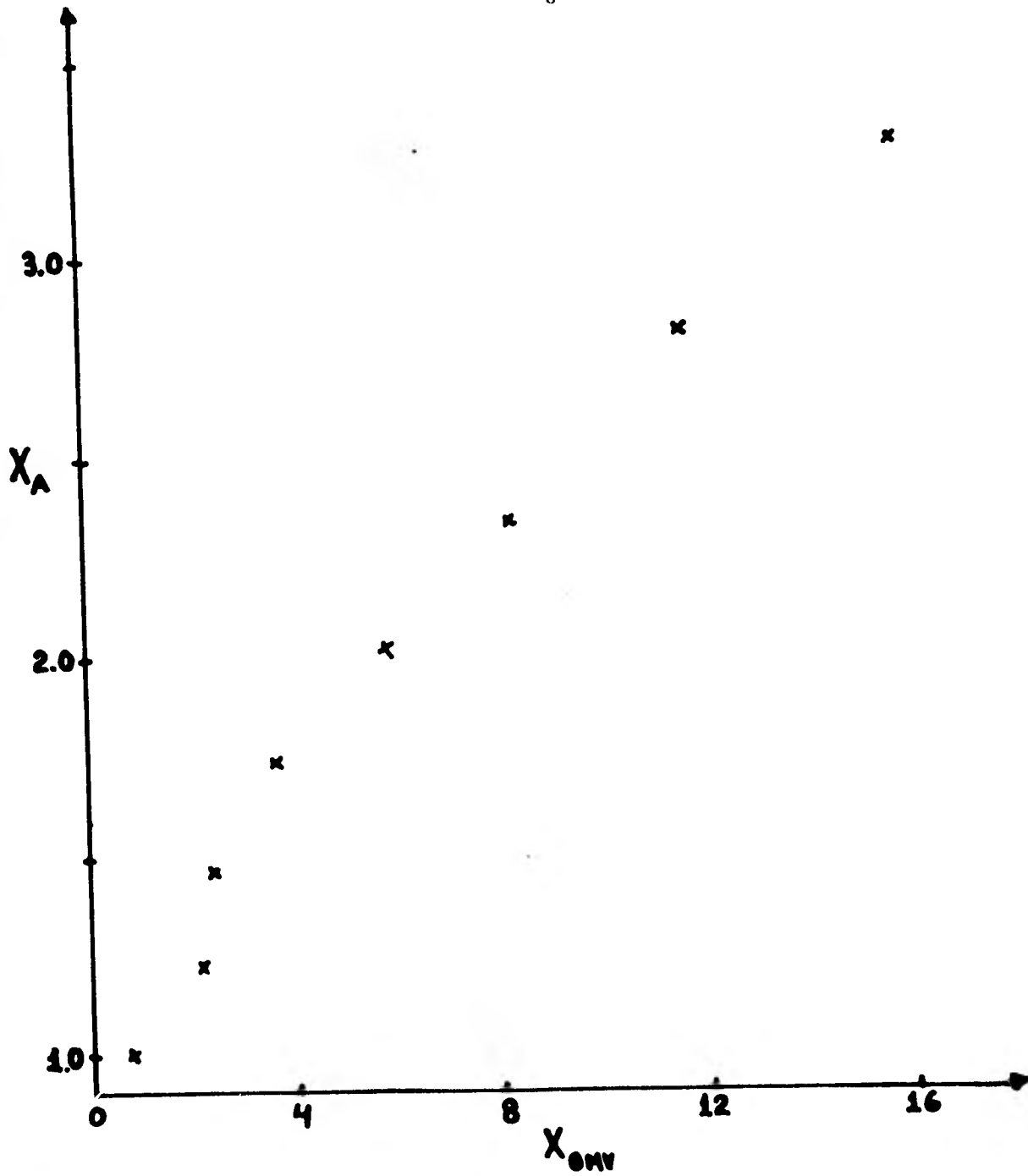
Posteriormente se calculó el coeficiente de correlación r y la ecuación de correlación lineal por periodos de elementos, utilizando el método de mínimos cuadrados descrito anteriormente. Los resultados se muestran en la tabla VII.

Una vez obtenida la ecuación de correlación, se calculó el valor de electronegatividad para aquellos elementos cuyo valor de electronegatividad se desconoce en una de las escalas. Los resultados obtenidos se presentan en la tabla VIII.

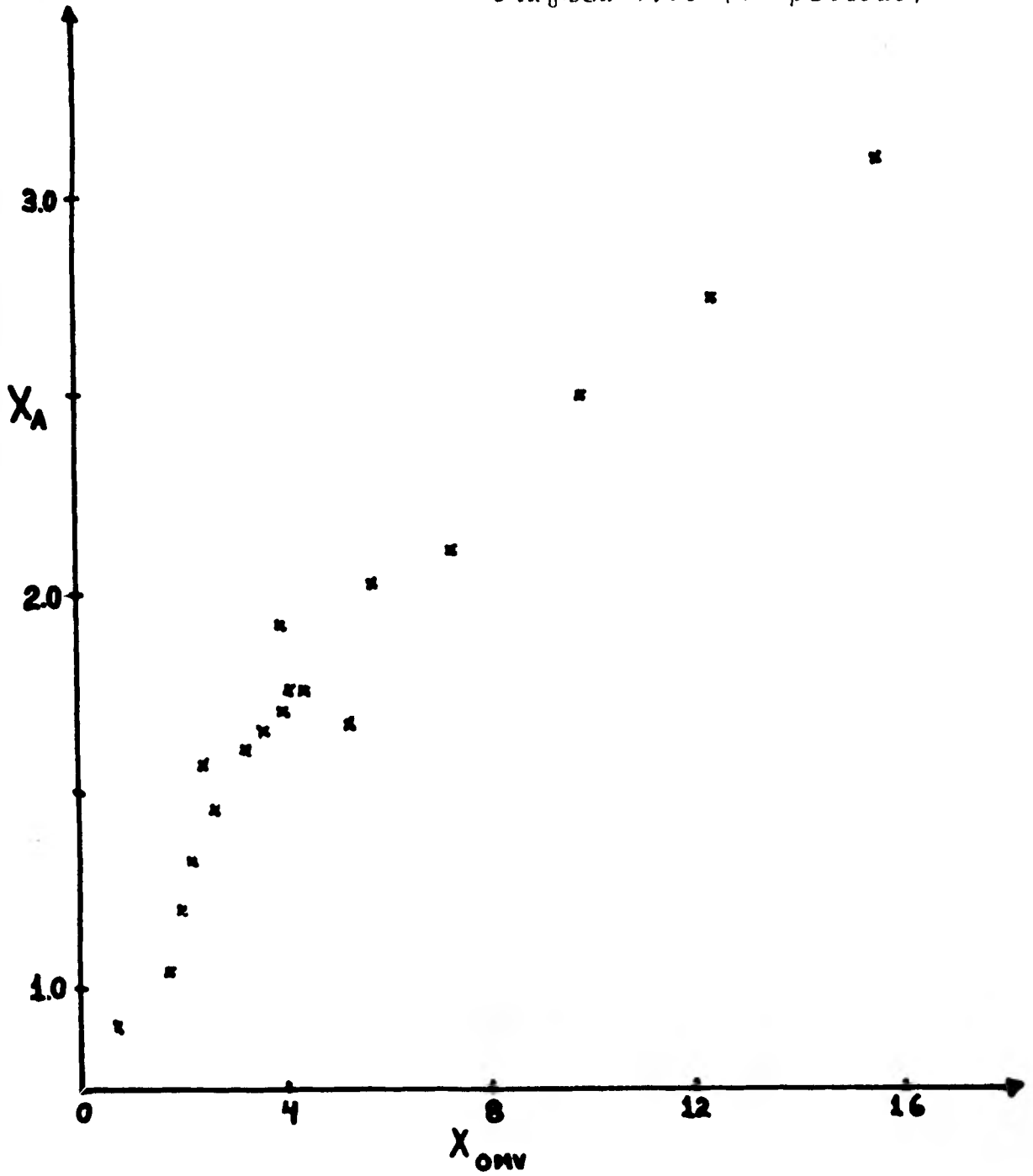
Gráfica 4.13 (2º periodo)



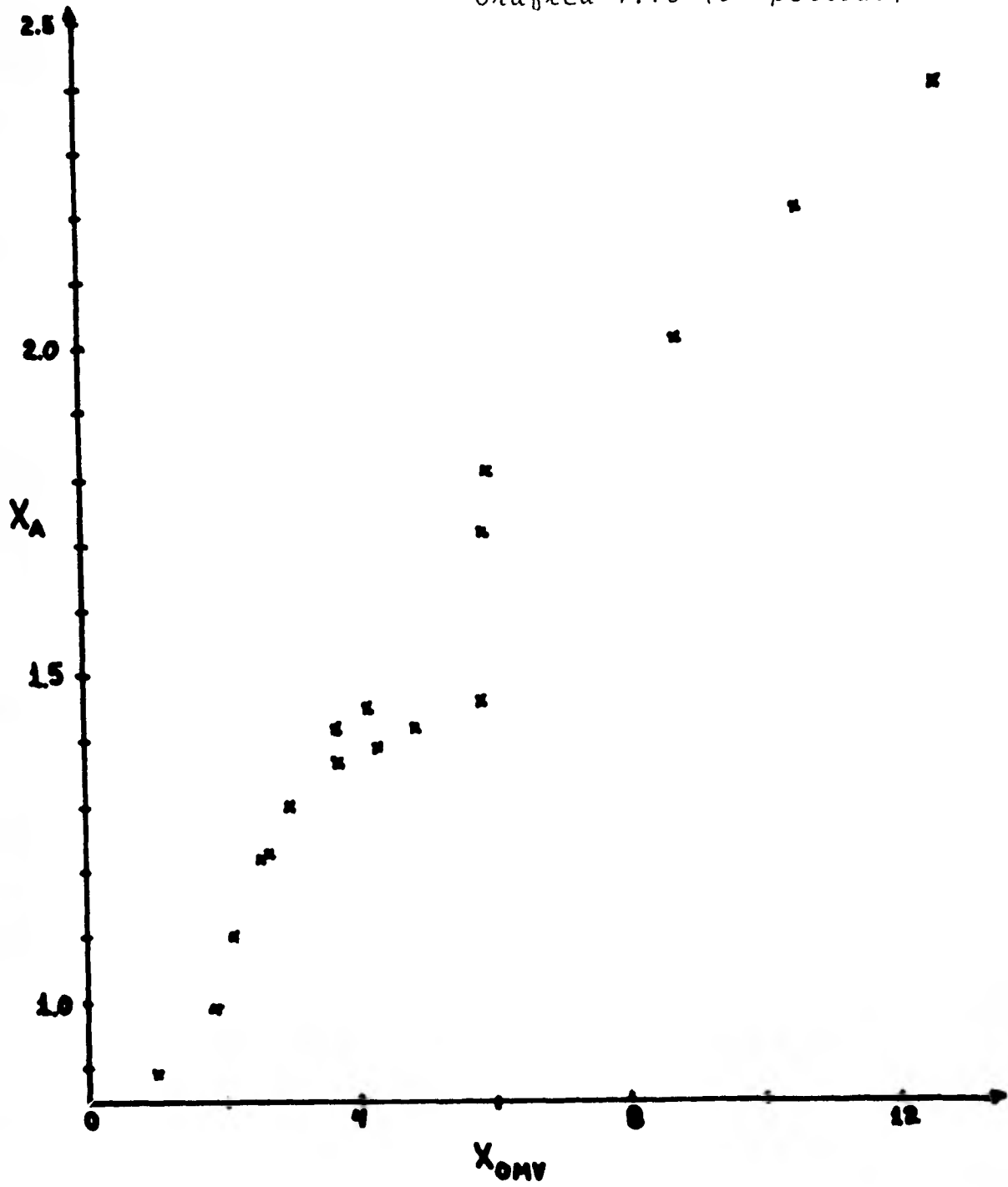
Gráfica 4.14 (3º periodo)



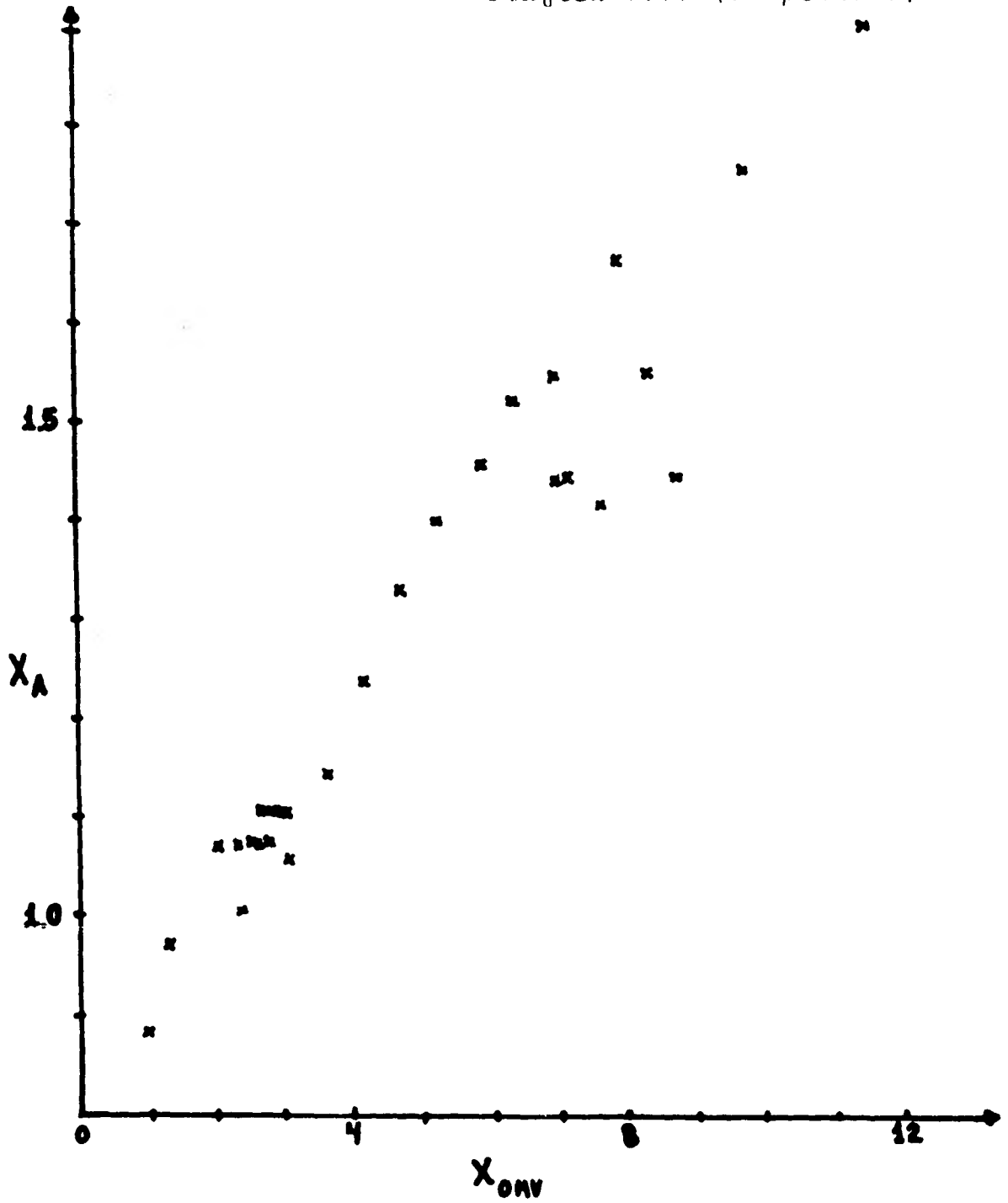
Gráfica 4.15 (4º periodo)



Gráfica 4.16 (5º período)



Gráfica 4.17 (6º periodo)



T A B L A V I I

A U T O R	P E R I O D O									
	3 - 10	r	11 - 18	r	19 - 36	r	37 - 54	r	55 - 86	r
ALLRED - ROCHOW	$X_A = 0.0824X_{OMV} + 1.4998$	0.97	$X_A = 0.1524X_{OMV} + 1.0493$	0.98	$X_A = 0.1398X_{OMV} + 1.0657$	0.96	$X_A = 0.1260X_{OMV} + 0.8685$	0.98	$X_A = 0.0903X_{OMV} + 0.8397$	0.93
GORDY	$X_G = 0.1676X_{OMV} + 1.1050$	0.74	$X_G = 0.2710X_{OMV} + 0.7653$	0.95	$X_G = 0.0933X_{OMV} + 1.2855$	0.64	$X_G = 0.1058X_{OMV} + 1.1146$	0.68	$X_G = 0.1352X_{OMV} + 0.8355$	0.81
MULLIKIN	$X_M = 0.0810X_{OMV} + 1.2983$	0.94	$X_M = 0.1703X_{OMV} + 0.9922$	0.89	$X_M = 0.1325X_{OMV} + 1.1443$	0.66	$X_M = 0.2121X_{OMV} + 0.5219$	0.85		
PALLING	$X_P = 0.0844X_{OMV} + 1.5036$	0.94	$X_P = 0.1918X_{OMV} + 0.9996$	0.98	$X_P = 0.1321X_{OMV} + 1.1696$	0.99	$X_P = 0.1179X_{OMV} + 1.2895$	0.67	$X_P = 0.1636X_{OMV} + 0.7810$	0.87
SANDERSON	$X_S = 0.0701X_{OMV} + 1.5515$	0.94	$X_S = 0.1670X_{OMV} + 1.0695$	0.96	$X_S = 0.1838X_{OMV} + 0.9407$	0.94	$X_S = 0.1647X_{OMV} + 0.7704$	0.93	$X_S = 0.1176X_{OMV} + 0.7254$	0.43

r = Coeficiente de correlación

X_{OMV} = Electronegatividad de ARMAS - ESPARZA

T A B L A VIII

<u>Z</u>	<u>x_A</u>	<u>x_G</u>	<u>x_M</u>	<u>x_P</u>	<u>x_S</u>
07		2.629			
08		3.490			
09		4.622			
10		6.047	5.021	5.386	
15		2.333			
16		3.030			
17		3.920			
18		4.987	3.645	3.980	
21		1.460			
27					1.575
28			1.727		1.650
35		2.449			
36		2.727	3.193		
39		1.345	0.985		
40			1.060		
41			1.084		
42			1.162		
43		1.510	1.314		
44			1.317		
45			1.393		
49		1.584			
53		2.243			
54		2.467	3.233		
61		1.196		1.215	
63		1.167		1.179	
64		1.216			
65		1.194		1.212	
66		1.220			
67		1.220			
68		1.230			
69		1.249			
70		1.261		1.292	
71		1.330			
84		2.154			1.864
85		2.409			2.083
86	2.061	2.679		2.995	2.316

4).- Relación del logaritmo natural de los valores de electronegatividad de Armas-Esparza, con los logaritmos naturales de electronegatividad de los autores antes mencionados.

En base al supuesto comportamiento exponencial por periodo de elementos, de las gráficas del número atómico Z versus electronegatividad para un autor, podemos decir que las gráficas de los periodos se describen con una ecuación del tipo:

$$x_1 = e^{m_1 Z + b_1} \text{ ó } x_1 = e^{m_1 Z} e^{b_1} \dots\dots\dots (4.8)$$

donde x_1 es la electronegatividad para el autor 1 - y, z es el número atómico del elemento. Para el autor 2 :

$$x_2 = e^{m_2 Z + b_2} \text{ ó } x_2 = e^{m_2 Z} e^{b_2} \dots\dots\dots (4.9)$$

Despejando z de la ecuación (4.8) tenemos:

$$Z = \frac{\ln x_1 e^{-b_1}}{m_1} \dots\dots\dots (4.10)$$

Substituyendo (4.10) en (4.9) :

$$x_2 = e^{m_2 \left(\frac{\ln x_1 e^{-b_1}}{m_1} \right)} e^{b_2} \dots\dots\dots (4.11)$$

Obteniendo el logaritmo natural en ambos lados de la ecuación (4.11) :

$$\ln x_2 = \frac{m_2}{m_1} \ln x_1 e^{-b_1} + \ln b_2 \dots (4.12)$$

$$\ln x_2 = \frac{m_2}{m_1} \ln x_1 + \frac{m_2}{m_1} \ln e^{-b_1} + \ln b_2$$

como los términos m_1 , m_2 , b_1 , y b_2 , son constantes:

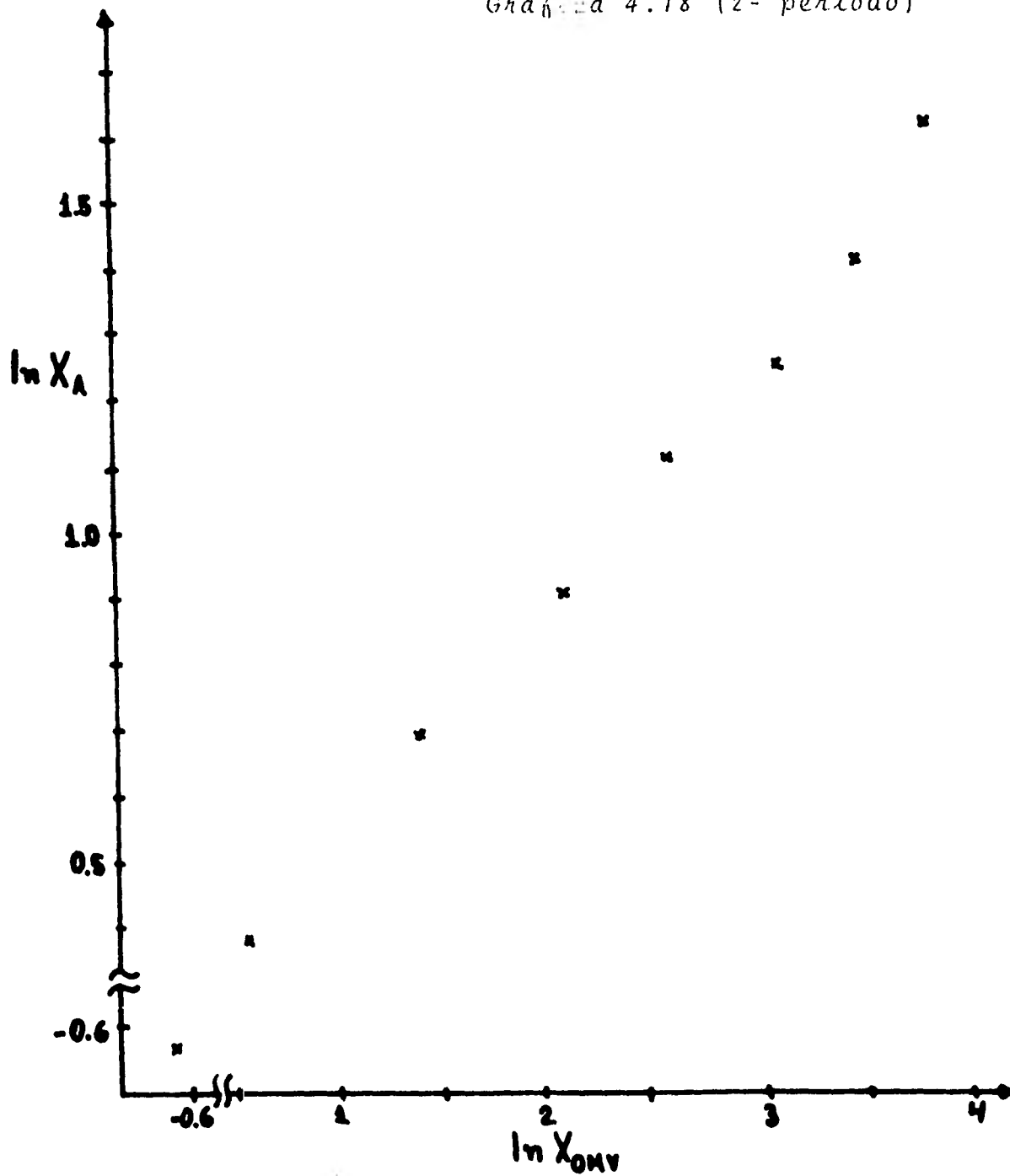
$$\ln x_2 = m \ln x_1 + b \dots (4.13)$$

donde b es una nueva constante y la ecuación (4.13) es la ecuación de una línea recta.

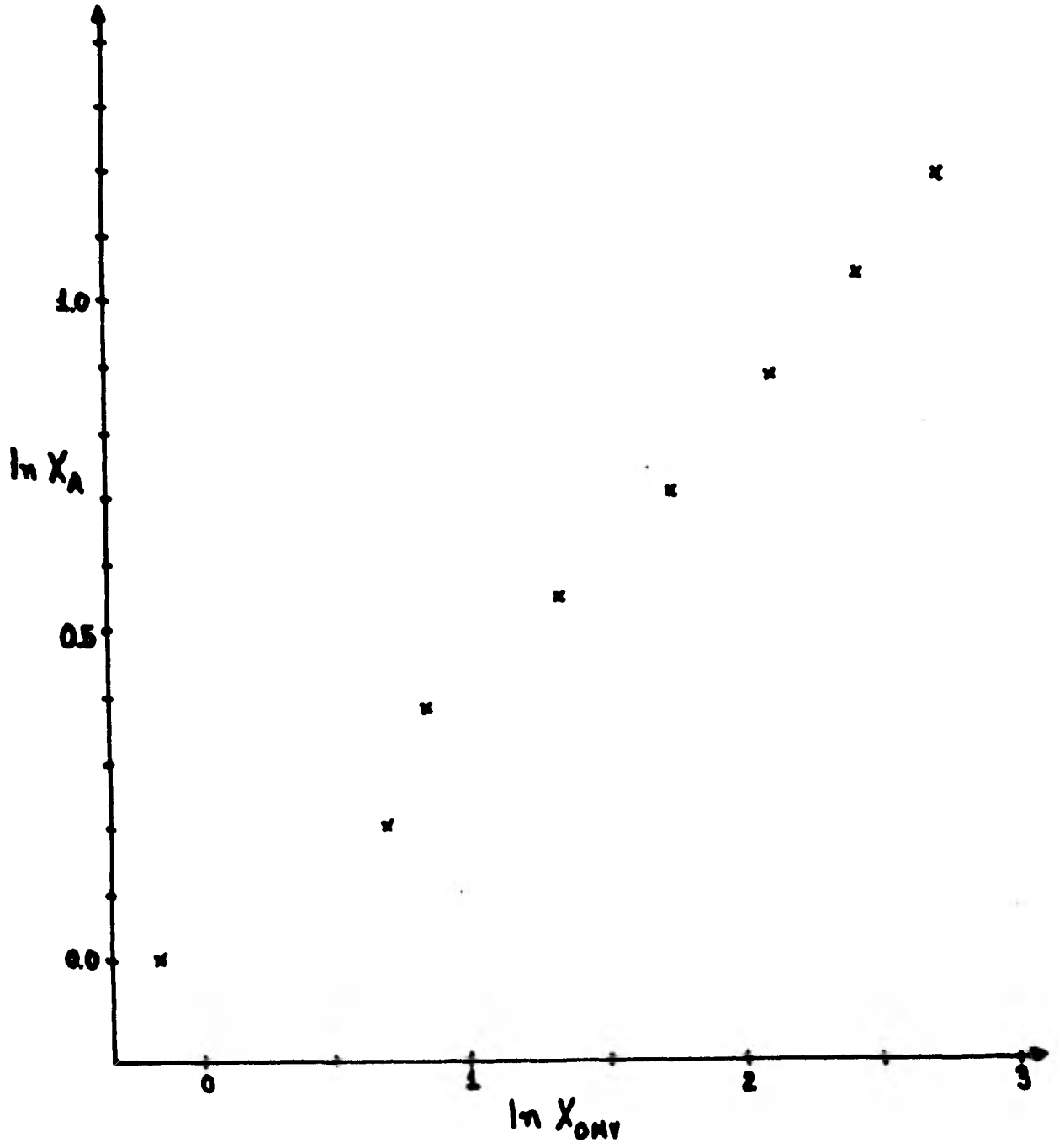
Se elaboraron las gráficas, por periodos, de $\ln X_{OMV}$ versus $\ln X_A$ enumeradas de 4.18 a 4.22, a manera de ejemplo.

Posteriormente se calculó el coeficiente y -- las ecuaciones de correlación lineal por periodo -- de elementos, y se calcularon los valores de electronegatividad para aquellos elementos que no lo tienen. Los resultados obtenidos se presentan en las tablas IX y X respectivamente.

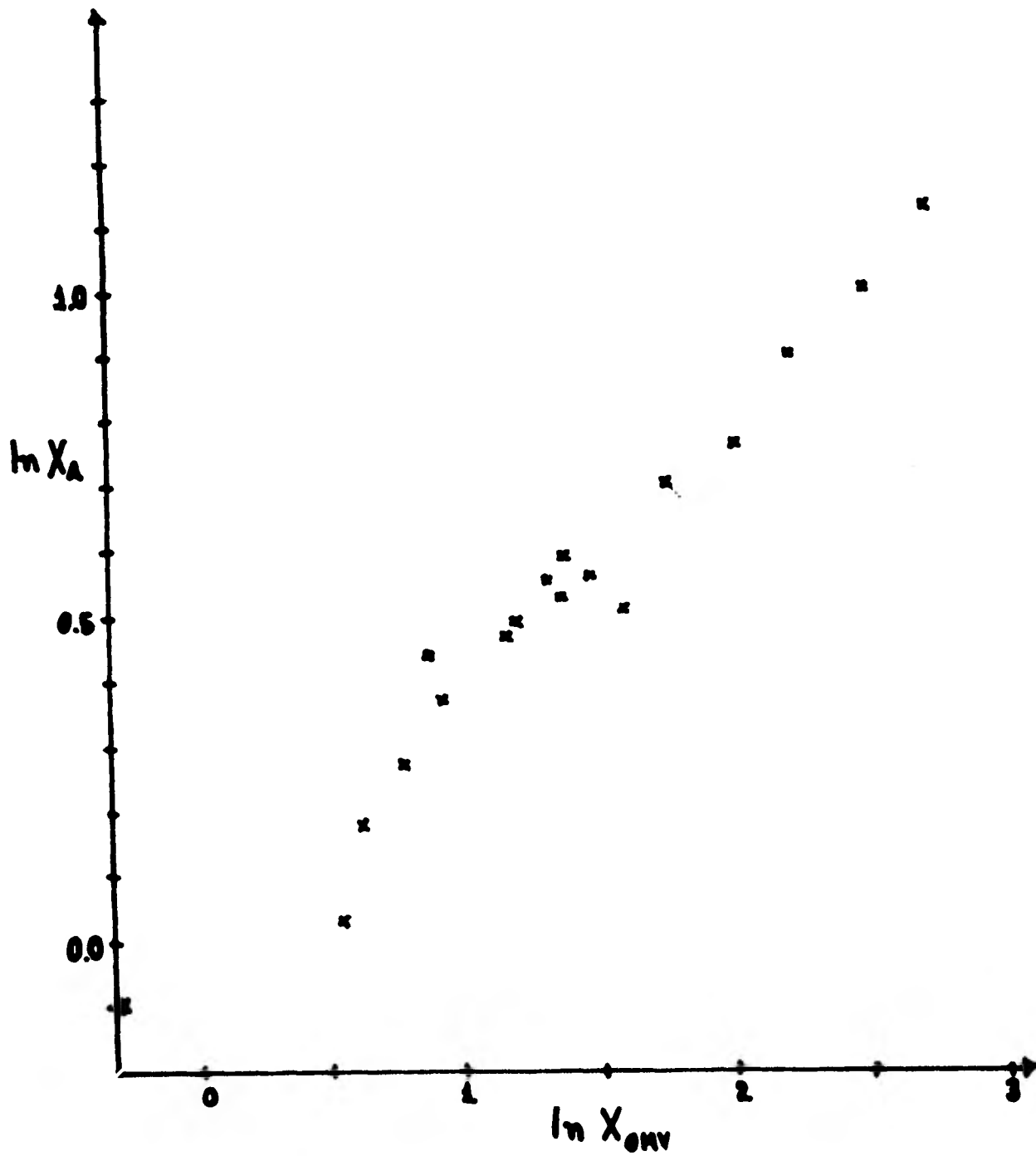
Γράφημα 4.18 (2^ο periodo)



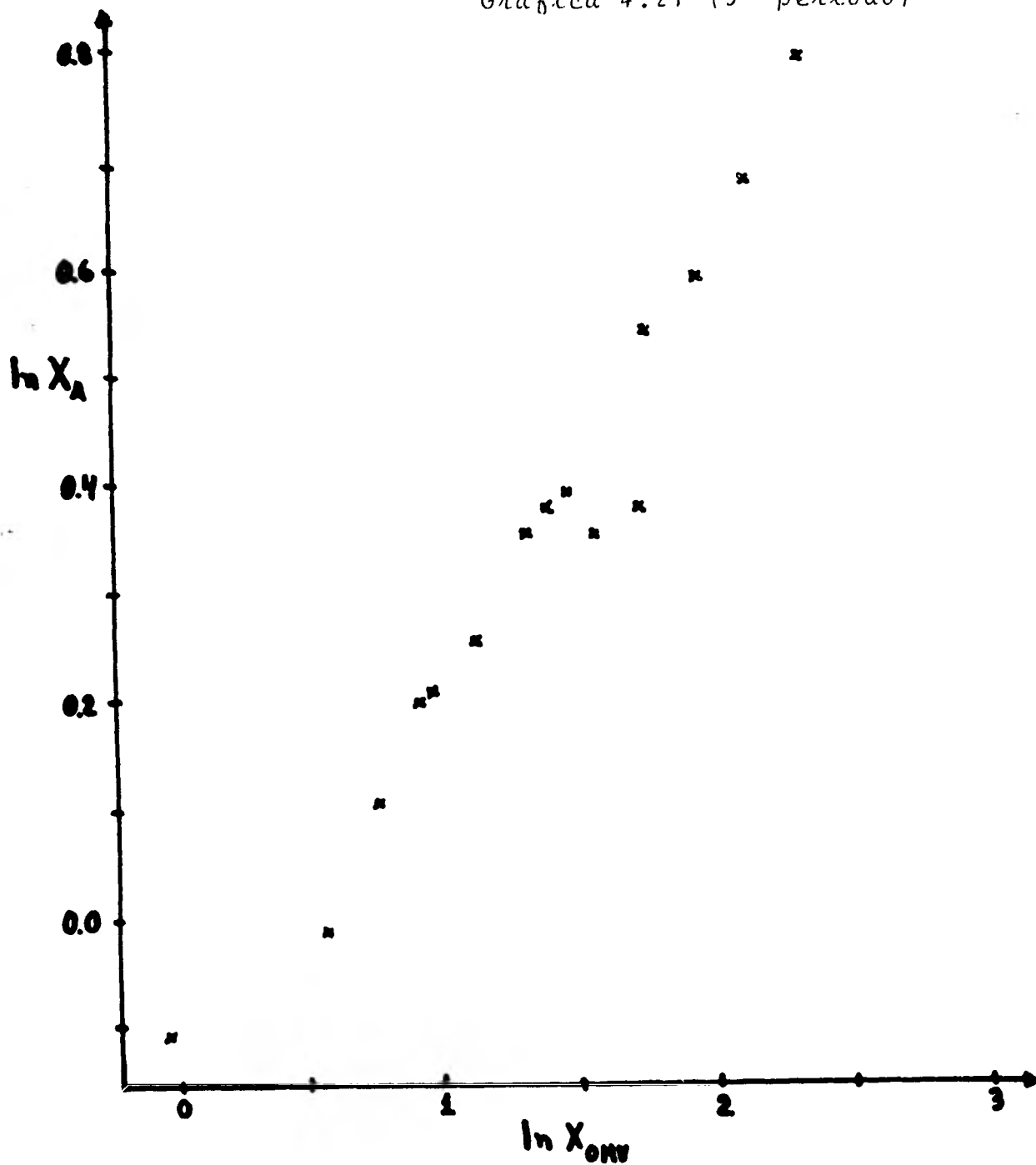
Gráfica 4.19 (3^o periodo)



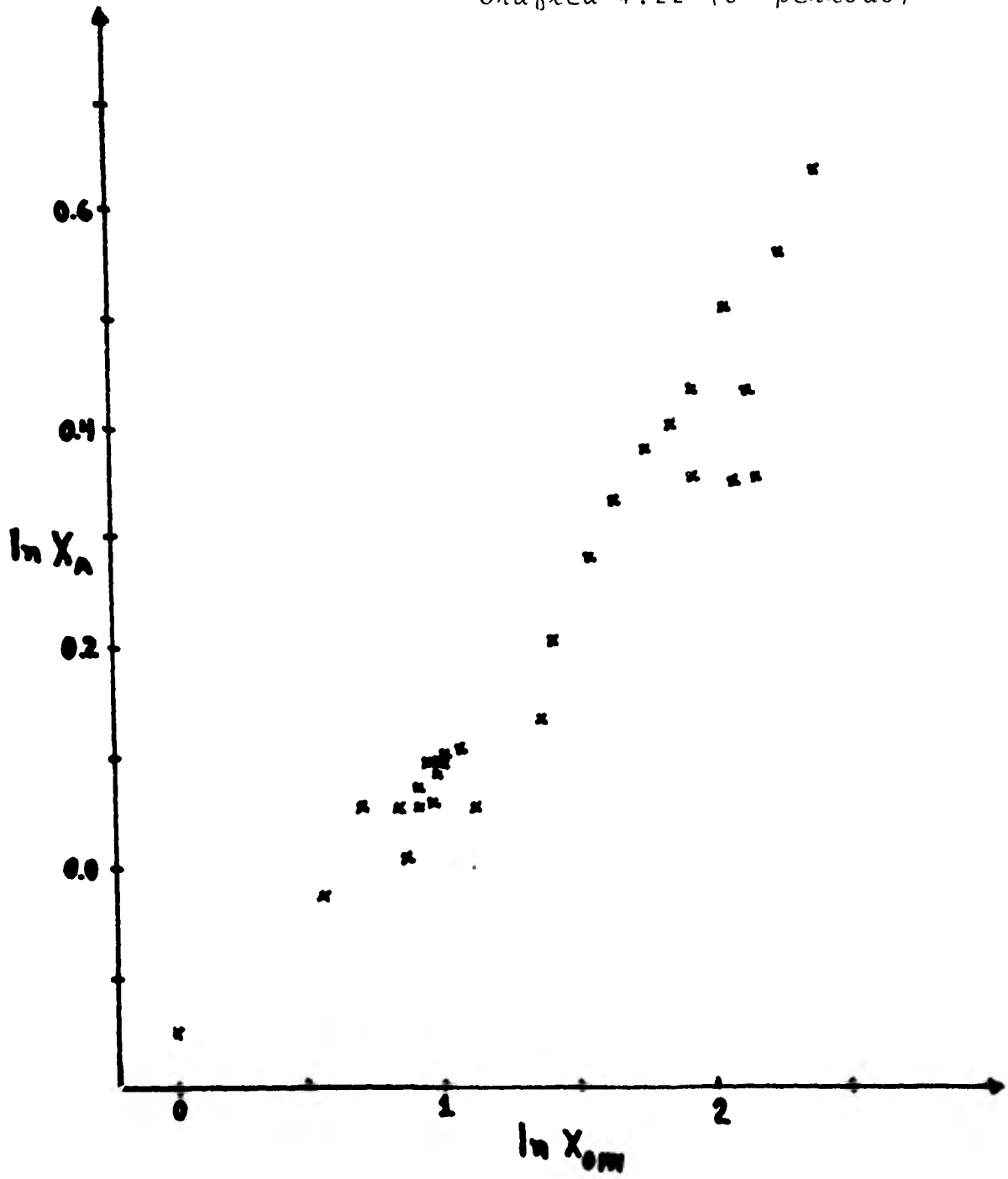
Gráfica 4.20 (4º periodo)



Gráfica 4.21 (5º periodo)



Gráfica 4.22 (6º periodo)



A U T O R	P E R I O D O									
	3 - 10	r	11 - 18	r	19 - 36	r	37 - 54	r	55 - 86	r
ALLRED - ROCHOW	$\text{Ln}X_A = 0.3638\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.1662$	0.99	$\text{Ln}X_A = 0.4179\text{Ln}X_{\text{OHV}} + 0.0081$	0.99	$\text{Ln}X_A = 0.4136\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.0391$	0.97	$\text{Ln}X_A = 0.3933\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.1826$	0.98	$\text{Ln}X_A = 0.3193\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.2251$	0.96
GORDY	$\text{Ln}X_G = 0.2791\text{Ln}X_{\text{OHV}} + 0.1214$	0.93	$\text{Ln}X_G = 0.4424\text{Ln}X_{\text{OHV}} + 0.0102$	0.98	$\text{Ln}X_G = 0.3459\text{Ln}X_{\text{OHV}} + 0.0419$	0.79	$\text{Ln}X_G = 0.3726\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.0646$	0.82	$\text{Ln}X_G = 0.4422\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.2621$	0.90
MULLIKEN	$\text{Ln}X_M = 0.3378\text{Ln}X_{\text{OHV}} + 0.1074$	0.98	$\text{Ln}X_M = 0.4848\text{Ln}X_{\text{OHV}} + 0.1024$	0.87	$\text{Ln}X_M = 0.4019\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.0241$	0.75	$\text{Ln}X_M = 0.6806\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.6127$	0.94		
PAULING	$\text{Ln}X_P = 0.3306\text{Ln}X_{\text{OHV}} + 0.2333$	0.99	$\text{Ln}X_P = 0.4576\text{Ln}X_{\text{OHV}} + 0.0071$	0.99	$\text{Ln}X_P = 0.4102\text{Ln}X_{\text{OHV}} + 0.0046$	0.95	$\text{Ln}X_P = 0.4275\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.0423$	0.86	$\text{Ln}X_P = 0.5211\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.3413$	0.92
SANDERSON	$\text{Ln}X_S = 0.3479\text{Ln}X_{\text{OHV}} + 0.1608$	0.99	$\text{Ln}X_S = 0.5034\text{Ln}X_{\text{OHV}} + 0.0585$	0.99	$\text{Ln}X_S = 0.5362\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.2388$	0.95	$\text{Ln}X_S = 0.5526\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.3921$	0.97	$\text{Ln}X_S = 0.4221\text{Ln}X_{\text{OHV}} - 0.4753$	0.89

r = Coeficiente de correlación

$\text{Ln}X_{\text{OHV}}$ = Logaritmo natural de la electronegatividad de ARMAS - ESPARZA

$\text{Ln}X$ = Logaritmo de la electronegatividad

T A B L A X

<u>Z</u>	<u>x_A</u>	<u>x_G</u>	<u>x_M</u>	<u>x_P</u>	<u>x_S</u>
07		2.360			
08		2.682			
09		2.989			
10		3.287	4.057	4.467	
15		2.152			
16		2.532			
17		2.932			
18		3.335	3.417	3.538	
21		1.297			
27					1.655
28			1.770		1.743
35		2.496			
36		2.688	2.933		
39		1.253	0.921		
40			1.021		
41			1.052		
42			1.149		
43		1.531	1.328		
44			1.331		
45			1.417		
49		1.632			
53		2.264			
54		2.422	3.069		
61		1.184	1.181		
63		1.140		1.129	
64		1.212			
65		1.180		1.170	
66		1.198			
67		1.218			
68		1.236			
69		1.257			
70		1.273		1.287	
71		1.363			
84		2.099			1.620
85		2.269			1.746
86	1.834	2.434		2.762	1.867

Estimación de electronegatividades de elementos--
cuyos valores, en las diversas escalas, no fueron
determinados.

Escala de Allred-Rochow.

En la tabla I se observa que Allred-Rochow--
no reportan el valor de electronegatividad para el
elemento con número atómico 86. A partir de los--
valores estimados en este trabajo (ver tablas IV,
VI, VIII y X), se tienen cuatro valores de electro
negatividad para dicho elemento, así como el va--
lor del coeficiente de correlación "r" de la ecua
ción correspondiente; todo lo cual se encuentra--
en las tablas III, V, VII y IX, y que a continua
ción se sintetiza:

ESCALA ALLRED-ROCHOW								
Z	Z vs. X_A		Z vs. $\ln X_A$		X_{OMV} vs. X_A		$\ln X_{OMV}$ vs. $\ln X_A$	
		r		r		r		r
86	1.678	0.91	1.708	0.93	2.061	0.93	1.834	0.96

Escala de Armas-Esparza.

Del mismo modo para la escala de electronegatividad de Armas-Esparza:

ESCALA ARMAS-ESPARZA								
Z	Z vs. X_{OMV}		Z vs. $\ln X_{OMV}$		X_{OMV} vs. X_A		$\ln X_{OMV}$ vs $\ln X_A$	
		r		r		r		r
46	5.236	0.92	4.372	0.96	3.821	0.98	3.412	0.98

Escala de Gordy.

De manera semejante a los casos anteriores, - para la escala de Gordy se obtuvieron los valores de electronegatividad siguientes:

ESCALA GORDY								
Z	Z vs. X_G		Z vs. $\ln X_G$		X_{OMV} vs. X_G		$\ln X_{OMV}$ vs $\ln X_G$	
		r		r		r		r
7	2.350	0.88	2.683	0.89	2.629	0.74	2.360	0.93
8	2.690	"	3.448	"	3.490	"	2.682	"
9	3.030	"	4.432	"	4.622	"	2.989	"

10	3.370	"	5.697	"	6.047	"	3.287	"
15	2.000	0.94	2.194	0.92	2.333	0.95	2.152	0.98
16	2.250	"	2.674	"	3.030	"	2.532	"
17	2.500	"	3.258	"	3.920	"	2.932	"
18	2.750	"	3.971	"	4.987	"	3.335	"
21	1.372	0.70	1.266	0.69	1.460	0.64	1.297	0.79
35	2.074	"	2.230	"	2.449	"	2.496	"
36	2.124	"	2.323	"	2.727	"	2.688	"
39	1.300	0.71	1.229	0.71	1.345	0.68	1.253	0.82
43	1.510	"	1.447	"	1.510	"	1.531	"
49	1.826	"	1.848	"	1.584	"	1.632	"
53	2.037	"	2.164	"	2.243	"	2.264	"
54	2.090	"	2.265	"	2.467	"	2.422	"
61	1.200	0.82	1.146	0.84	1.196	0.81	1.184	0.90
63	1.270	"	1.208	"	1.167	"	1.140	"
64	1.305	"	1.239	"	1.216	"	1.212	"
65	1.339	"	1.272	"	1.194	"	1.180	"
66	1.374	"	1.306	"	1.220	"	1.198	"
67	1.409	"	1.340	"	1.220	"	1.218	"
69	1.478	"	1.411	"	1.249	"	1.257	"
70	1.513	"	1.449	"	1.261	"	1.273	"
71	1.584	"	1.478	"	1.330	"	1.363	"
84	1.999	"	2.084	"	2.154	"	2.099	"
85	2.034	"	2.139	"	2.409	"	2.269	"
86	2.069	"	2.195	"	2.675	"	2.434	"

Escala de Mulliken.

Para la escala de electronegatividad de Mulliken resultaron los valores siguientes:

ESCALA MULLIKEN								
Z	Z vs. X_M		Z vs. $\ln X_M$		X_{OMV} vs. X_M		$\ln X_{OMV}$ vs X_M	
		r		r		r		r
10	4.090	0.97	5.059	0.95	5.021	0.94	4.057	0.98
18	3.131	0.94	3.762	0.92	3.655	0.89	3.417	0.87
28	1.808	0.70	1.722	0.74	1.727	0.66	1.770	0.75
36	2.458	"	2.635	"	3.193	"	2.933	"
39	0.741	0.89	0.721	0.94	0.985	0.85	0.921	0.94
40	0.858	"	0.789	"	1.060	"	1.021	"
41	0.976	"	0.864	"	1.084	"	1.052	"
42	1.093	"	0.946	"	1.162	"	1.149	"
43	1.211	"	1.036	"	1.314	"	1.328	"
44	1.328	"	1.135	"	1.317	"	1.331	"
45	1.445	"	1.242	"	1.393	"	1.417	"
46	1.563	"	1.360	"	1.414	"	1.441	"
54	2.502	"	2.809	"	3.233	"	3.089	"

Escala de Pauling.

Para la escala de Pauling se obtuvo:

Z	ESCALA PAULING							
	Z vs. X_p		Z vs. $\ln X_p$		X_{OMV} vs. X_p		$\ln X_{OMV}$ vs X_p	
		r		r		r		r
10	4.447	0.99	5.537	0.97	5.386	0.94	4.446	0.99
18	3.350	0.99	3.902	0.99	3.980	0.98	3.538	0.99
61	1.170	0.86	1.089	0.90	1.215	0.87	1.181	0.92
63	1.215	"	1.164	"	1.179	"	1.129	"
65	1.313	"	1.243	"	1.242	"	1.170	"
70	1.558	"	1.467	"	1.292	"	1.287	"
86	2.341	"	2.498	"	2.995	"	2.762	"

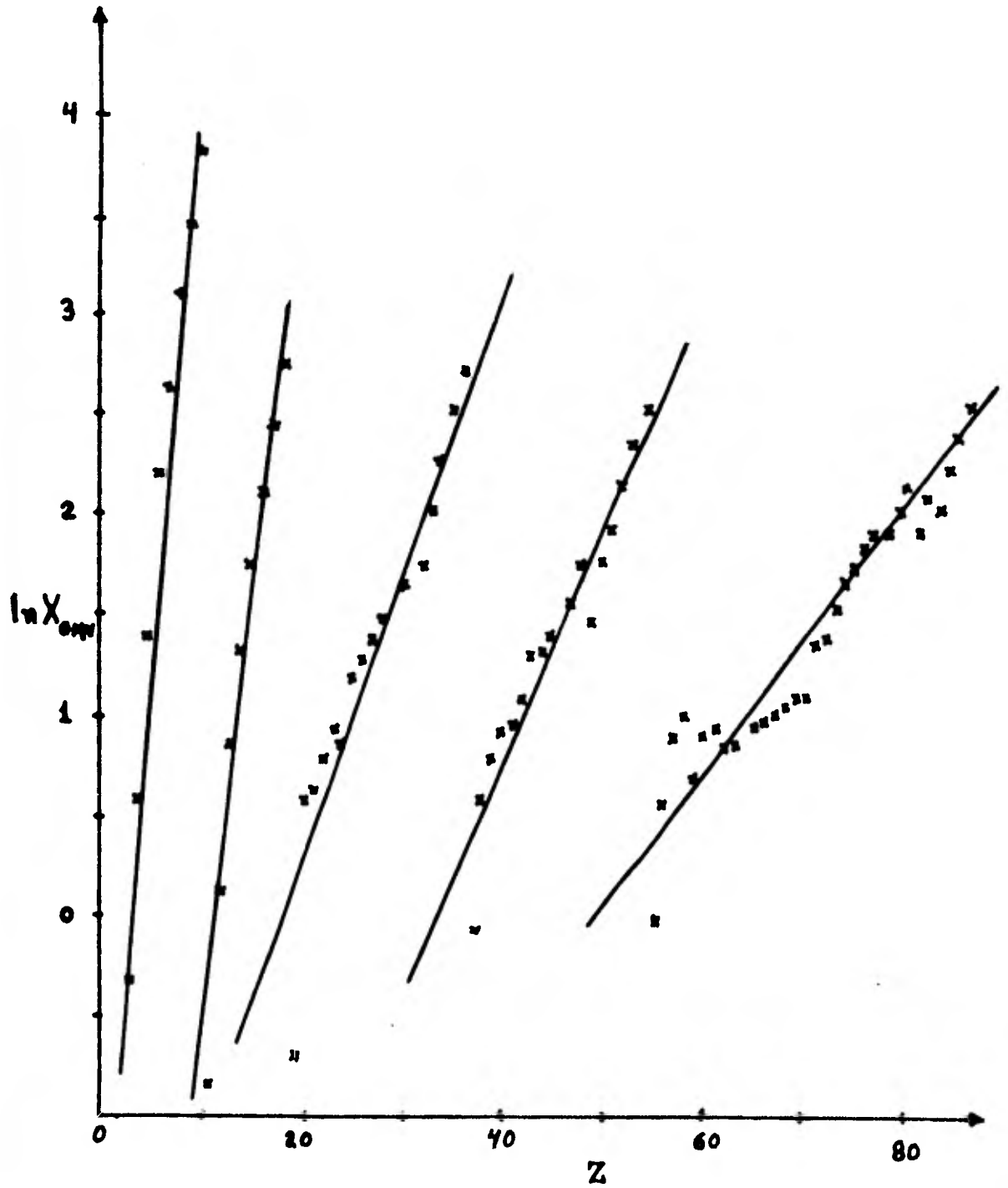
Escala de Sanderson.

Finalmente, para Sanderson se obtuvo:

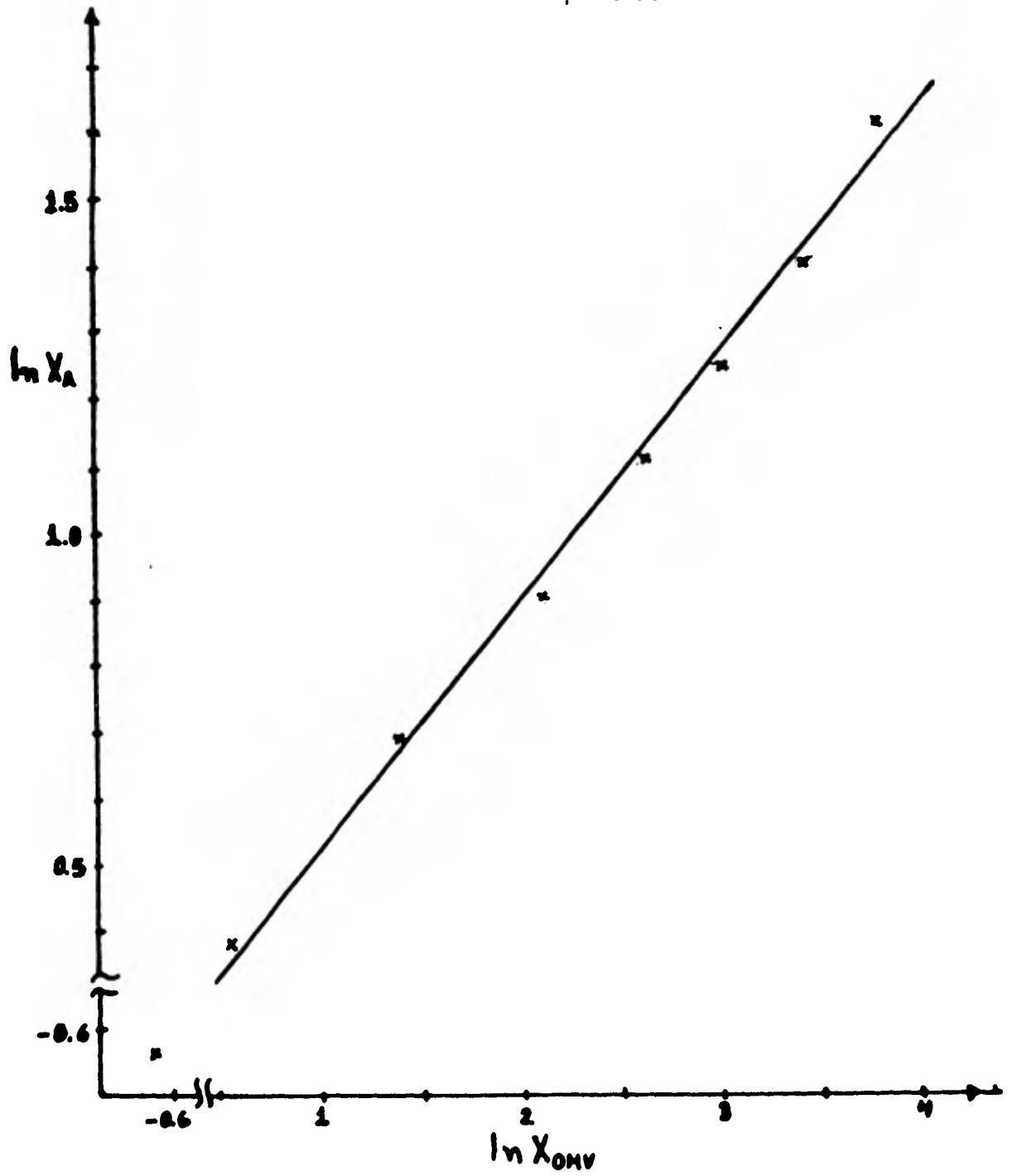
Z	ESCALA SANDERSON							
	Z vs. X_S		Z vs. $\ln X_S$		X_{OMV} vs. X_S		$\ln X_{OMV}$ vs. X_S	
		r		r		r		r
27	1.790	0.93	1.572	0.94	1.575	0.94	1.655	0.94
28	1.935	"	1.639	"	1.650	"	1.743	"
84	1.752	0.96	1.593	0.84	1.864	0.85	1.620	0.89
86	1.821	"	1.678	"	2.316	"	1.867	"

En la parte correspondiente a las conclusiones se enuncian los criterios de ponderación que se utilizaron para poder, finalmente, dar un valor estimado de electronegatividad, en las escalas co--rrespondientes, de aquellos elementos que no lo--tienen.

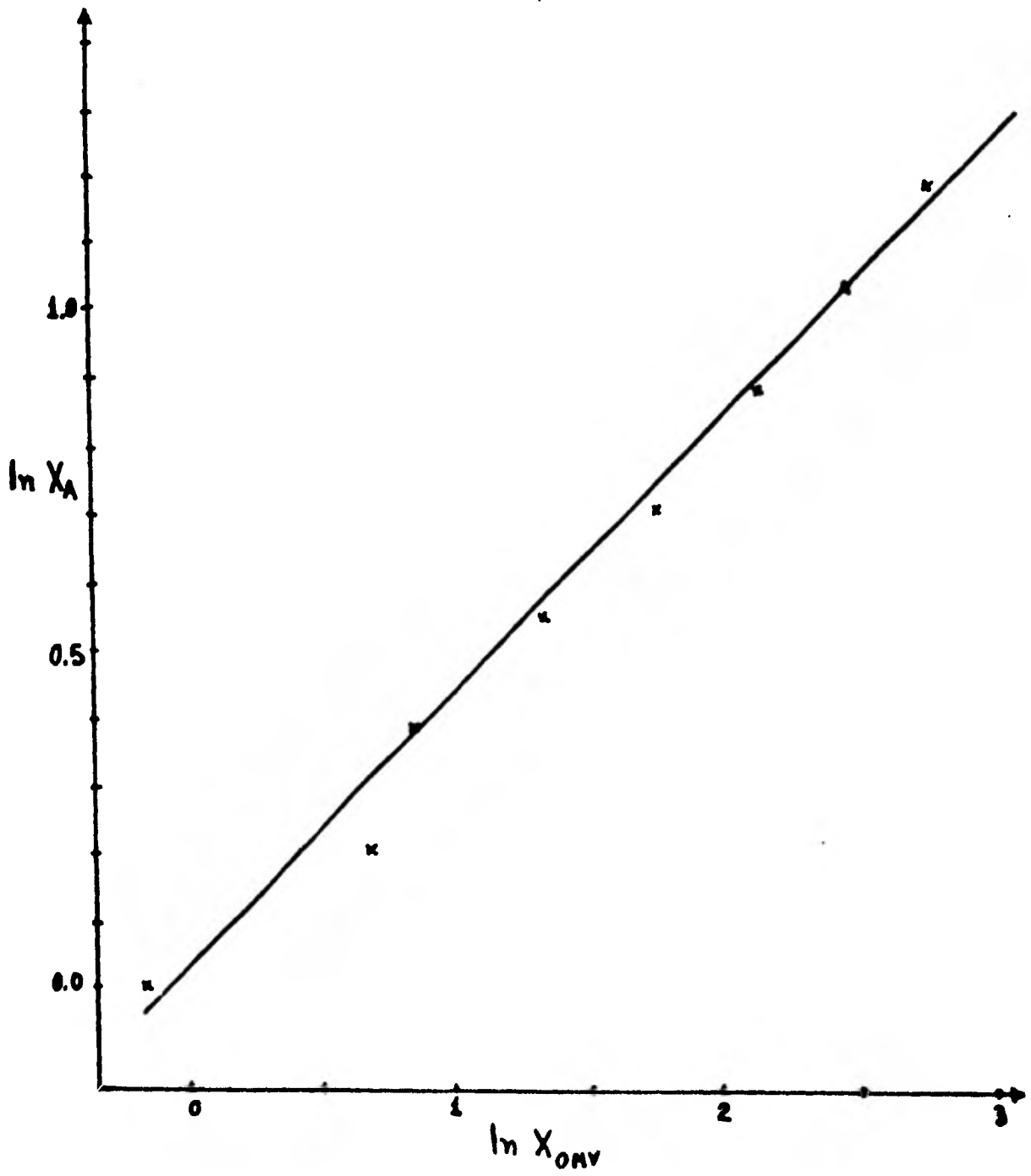
A manera de ejemplo, por último, se presen--tan las gráficas de Z vs. $\ln X_{OMV}$ y de $\ln X_{OMV}$ vs. $\ln X_A$ así como las rectas teóricas obtenidas por medio de las ecuaciones calculadas y que se mostraron en las tablas V y IX respectivamente.



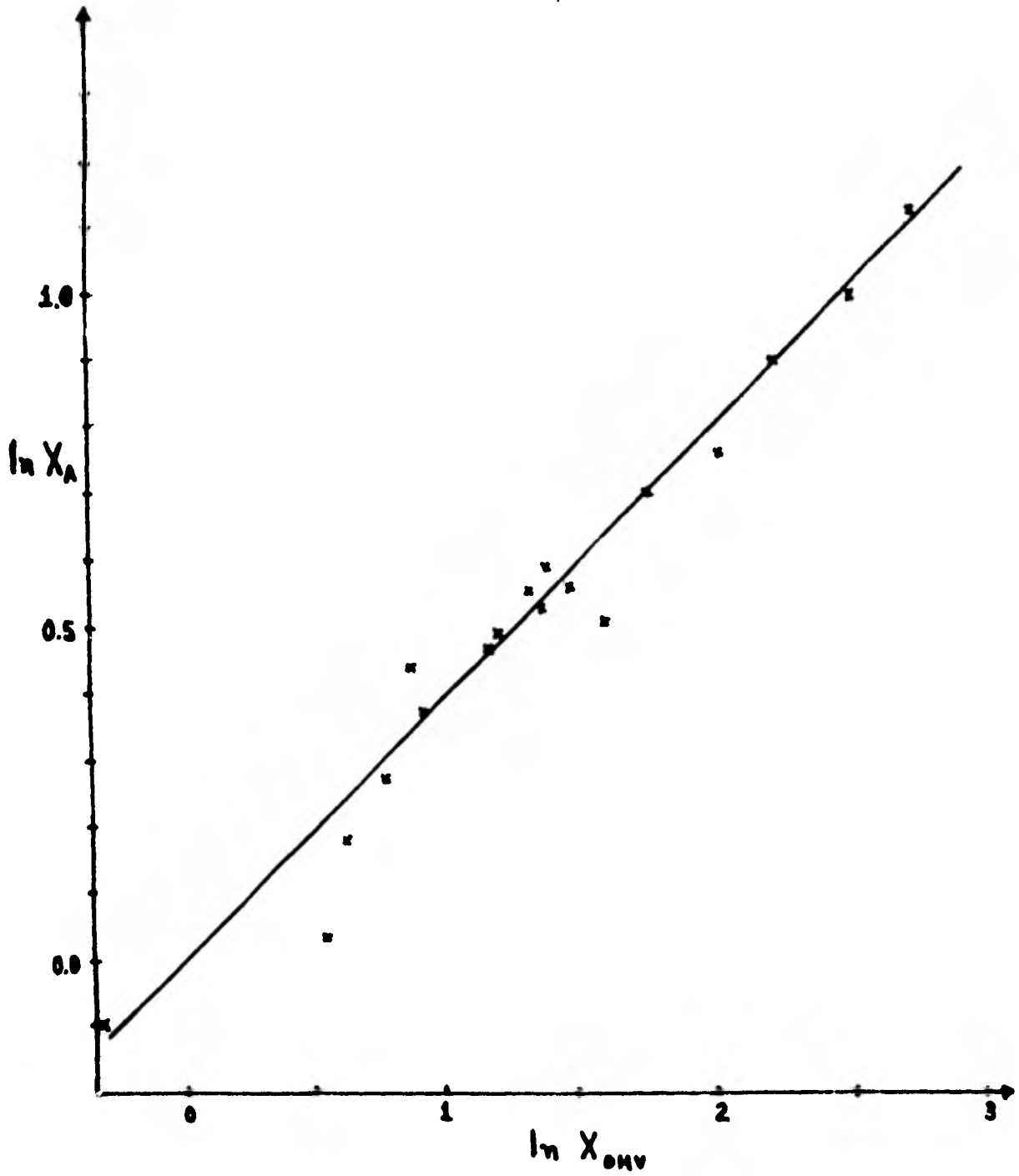
2º periodo



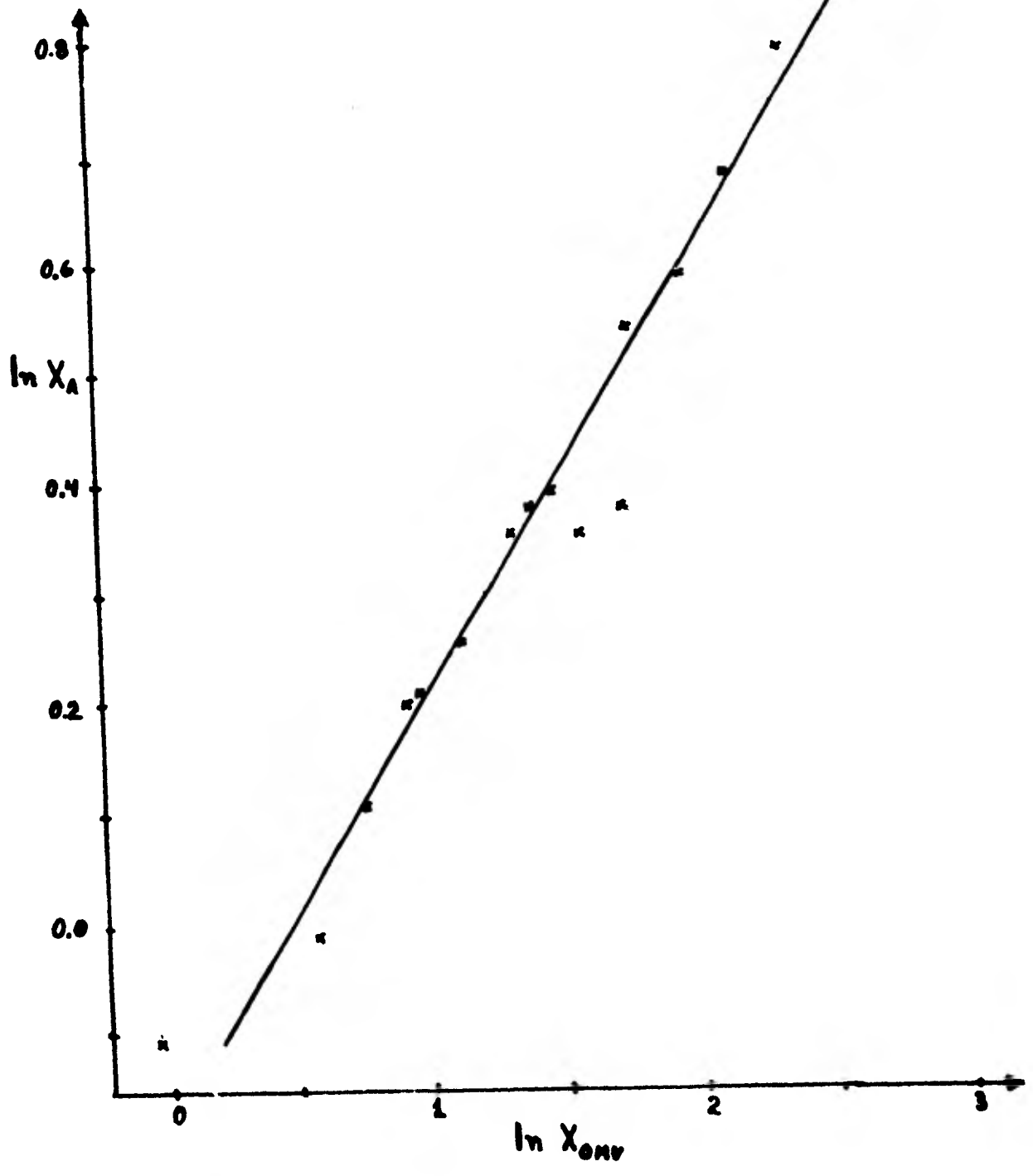
3º periodo



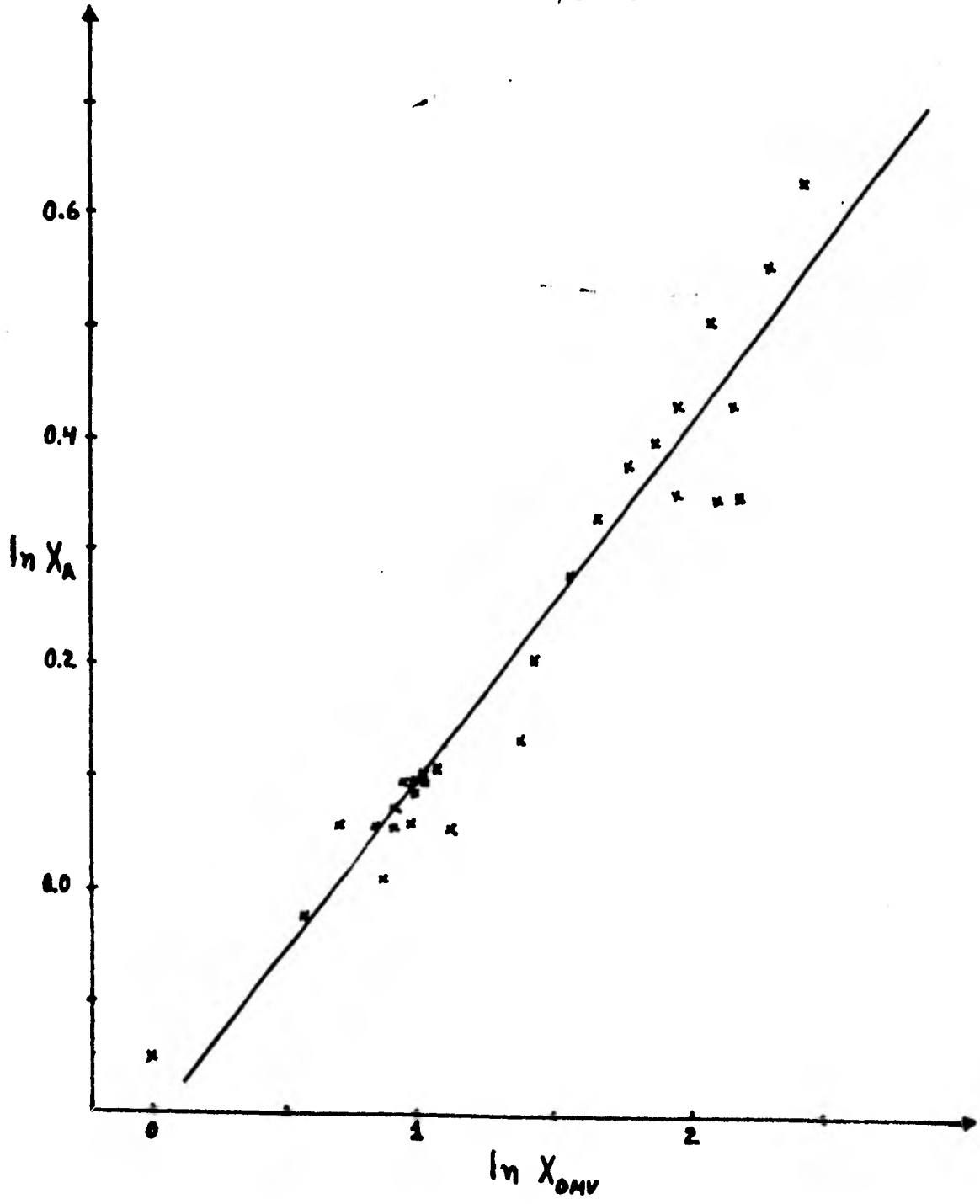
4º periodo



5º periodo



6^o periodo



Correlación por polinomios.

Como se mencionó en la introducción, el problema que se estudia en este tema de tesis es relacionar los valores de electronegatividad de dos autores, por ejemplo, X_{OMV} con X_P a través de un polinomio de correlación $P_n(X_{OMV})=X_P$ con el cual si se conoce un valor de X_{OMV} se puede calcular el valor correspondiente de $P_n(X_{OMV})=X_P$.

La función de correlación mas adecuada para este propósito es la llamada "fórmula interpolante de Newton" (2) que tiene la forma:

$$P_n(X) = f(X_0) + f(X_0, X_1)(X-X_0) + f(X_0, X_1, X_2)(X-X_0)(X-X_1) + \dots + f(X_0, X_1, \dots, X_n)(X-X_0)(X-X_1)\dots(X-X_n) \dots \dots \dots (4.14)$$

Este polinomio de grado n , interpola la función $f(X)$ en los $n+1$ puntos distintos $X_0 \dots X_n$, y para calcular los coeficientes constantes ----- $f(X_0, X_1)$, $f(X_0, X_1, X_2)$, ..., $f(X_0, \dots, X_n)$ llamados "diferencias divididas" se puede utilizar las siguiente tabla:

x_i	$\delta(x)$	$\delta(,)$	$\delta(,,)$	$\delta(,,,)$	$\delta(,,,,)$
x_0	$\delta(x_0)$	$> \delta(x_0, x_1)$	$> \delta(x_0, x_1, x_2)$	$> \delta(x_0, x_1, x_2, x_3)$	$> \delta(x_0, x_1, x_2, x_3, x_4)$
x_1	$\delta(x_1)$	$> \delta(x_1, x_2)$	$> \delta(x_1, x_2, x_3)$	$> \delta(x_1, x_2, x_3, x_4)$	
x_2	$\delta(x_2)$	$> \delta(x_2, x_3)$	$> \delta(x_2, x_3, x_4)$		
x_3	$\delta(x_3)$	$> \delta(x_3, x_4)$			
x_4	$\delta(x_4)$				
.	.				
.	.				
.	.				
x_n	$\delta(x_n)$				

Las diferencias divididas de la tercera columna se obtienen con base en los datos de las dos primeras columnas de la siguiente manera:

$$\delta(X_0, X_1) = \frac{\delta(X_0) - \delta(X_1)}{X_0 - X_1}$$

Las diferencias divididas de la cuarta columna se obtienen en base a los datos de las columnas primera y tercera de la siguiente manera:

$$\delta(X_0, X_1, X_2) = \frac{\delta(X_0, X_1) - \delta(X_1, X_2)}{X_0 - X_2}$$

Las diferencias divididas de la quinta columna se obtienen con base en los datos de las columnas primera y cuarta de la siguiente manera:

$$\delta(X_0, X_1, X_2, X_3) = \frac{\delta(X_0, X_1, X_2) - \delta(X_1, X_2, X_3)}{X_0 - X_3}$$

De forma similar se calculan las diferencias divididas de las columnas sucesivas cuando estas se requieran utilizando el siguiente algoritmo:

Para $k=1, \dots, n$; hacer

 Para $i=0, \dots, n$; hacer

 Calcular:

$$f(x_i, \dots, x_{i+k}) = \frac{f(x_{i+1}, \dots, x_{i+k}) - f(x_i, \dots, x_{i+k-1})}{x_{i+k} - x_i}$$

..... (4.15)

Cuando la tabla de diferencias divididas está llena, los coeficientes $f(x_0, \dots, x_i)$, $i=0, \dots, n$ del polinomio de Newton (ec. 3.23) se puede hallar en el encabezamiento de las respectivas columnas.

Para los fines que perseguimos es necesario expresar el polinomio de interpolación de Newton en términos de potencia en x como se muestra a---
continuación:

$$P_n = b_0 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3 + \dots + b_nx^n \dots \dots \dots (4.16)$$

esta conversión se logra utilizando el algoritmo de multiplicación encajada:

dados los $n+1$ coeficientes $f(x_0)$, $f(x_0, x_1)$, ..., $f(x_0, \dots, x_n)$ del polinomio $P_n(x)$ basados en los---
 x_0, \dots, x_n puntos; y dado el número z :

Tomar $b_n = a_n$

Para $i = n-1, \dots, 0$; hacer:

Tomar $b_i = a_i + (z - y_{i+1}) b_{i+1} \dots \dots \dots (4.17)$

Los valores b_0, \dots, b_n resultantes del algoritmo anterior, son los coeficientes del polinomio de Newton expresado como potencias en X .

La obtención de polinomios de grado mayor a tres es sumamente laboriosa y solo puede efectuarse, mas o menos fácilmente, con el auxilio de una computadora. En nuestro caso se empleó la computadora del Centro de Sistemas de Cómputo de la U.N.A.M., contándose con la asesoría del ing. Jesus Ruiz Guillén.

Con base a los algoritmos (4.15) y (4.17) se elaboró un programa con el cual se procedió a relacionar la escala de Pauling X_p , para el segundo periodo de la tabla cuántica, que comprende los elementos químicos cuyos números atómicos van del 3 al 10.

Se alimentaron al programa mencionado los valores siguientes de $X = X_{OMV}$ y de $f(X_{OMV}) = X_p$:

Z	$X=X_{OMV}$	$f(X_{OMV})=X_P$
3	0.508	0.980
4	1.768	1.570
5	4.021	2.040
6	8.378	2.550
7	14.174	3.040
8	22.189	3.440
9	32.702	3.980
10	45.957	

Se corrió el programa y se obtuvo el siguiente polinomio interpolante de Newton de grado sexto:

$$f(X) = 0.61837970937 + 0.80097455769 X - 0.18764480255 X^2 + 0.024853345127 X^3 - 0.00165707530712 X^4 + 5.21279105135 X^5 - 6.0977507424 X^6 \dots\dots\dots (4.18)$$

Se verificó el polinomio con los valores de X que se emplearon con el objeto de comprobar si es que dicho polinomio pasa exactamente por los puntos tabulados, resultando:

Valor de X	Valor $f(X)$ inicial	Valor $f(X)$ con el polinomio
0.508	0.980	0.980
1.768	1.570	1.570
4.021	2.040	2.040

8.378	2.550	2.550
14.174	3.040	3.040
22.189	3.440	3.440
32.702	3.980	3.980

De los datos de electronegatividad de la tabla I se observa que el elemento $Z=10$ tiene un valor de X_{OMV} igual a 45.957 y carece del valor correspondiente en la escala de Pauling X_p , por lo que se procedió a calcularlo con el polinomio---- (4.18) resultando:

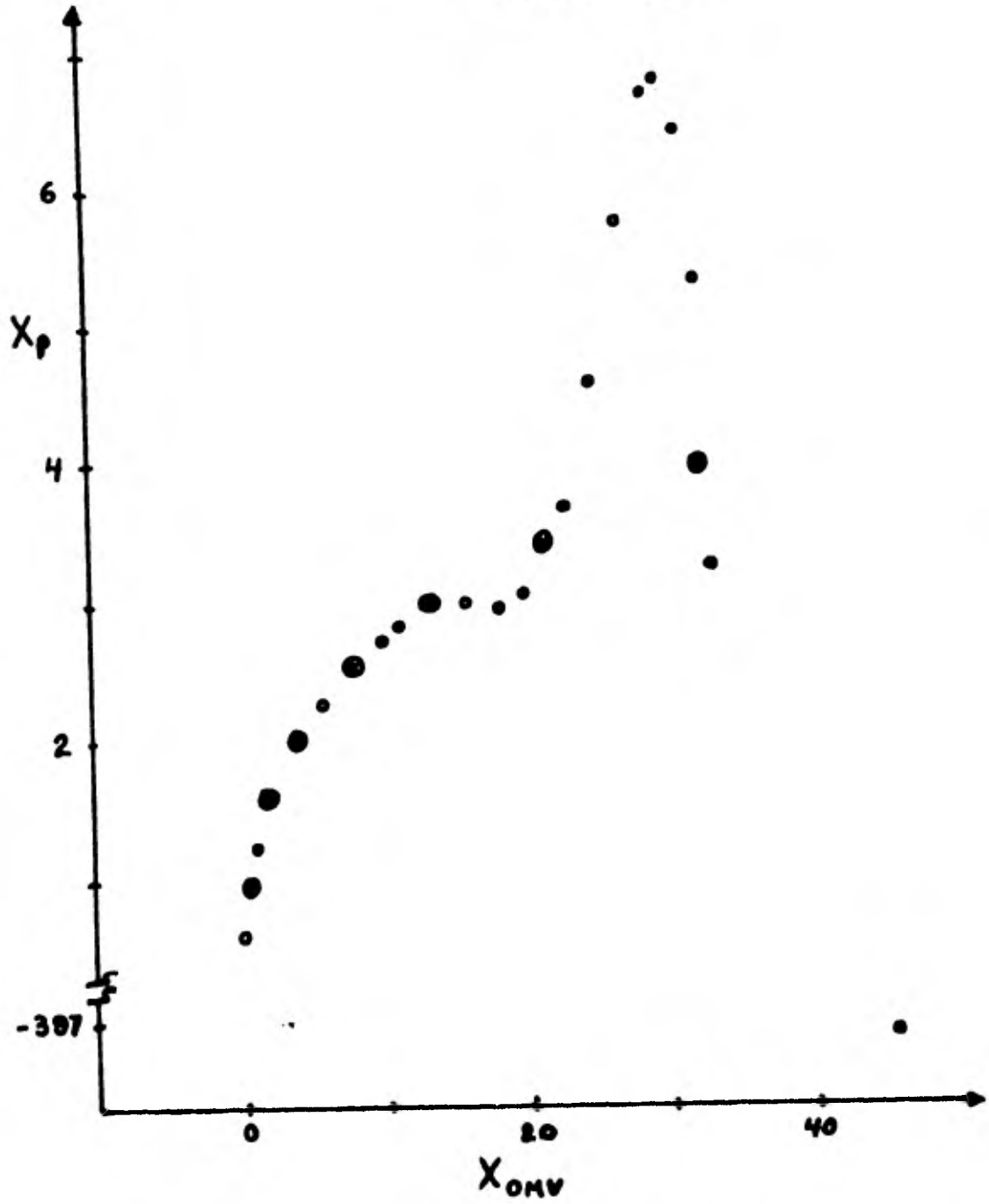
45.957

-396.847

Como se observa, la electronegatividad para la escala de Pauling $f(X)$ calculada con el polinomio de Newton para el elemento $Z=10$ es un valor-- totalmente absurdo y por lo tanto es nada consistente con los valores comunes de electronegatividad.

Por obtener el resultado anterior, para $Z=10$, se hizo la gráfica X_{OMV} versus $f(X)$ para Pauling-- calculada con el polinomio de Newton, y así analizar su comportamiento dentro del rango $Z=3$ a $Z=10$. A esta gráfica le llamamos 4.23.

Gráfica 4.23



A continuación se procedió a relacionar las electronegatividades de X_{OMV} con X_p para el tercer periodo de la tabla cuántica y se obtuvo un comportamiento muy similar al caso anterior.

Posteriormente se efectuaron cálculos semejantes relacionando otras escalas y otros periodos repitiéndose un comportamiento similar; por lo que en relación al uso de los polinomios interpolantes de Newton se puede concluir lo siguiente:

- 1.- Los valores obtenidos por interpolación o extrapolación con el polinomio, para nuestro caso, no son confiables, puesto que no siguen la tendencia normal observada por los puntos correlacionados, sino que oscilan aleatoriamente para pasar exactamente por los puntos tabulares.
- 2.- El empleo de polinomios para relacionar electronegatividades es sumamente laborioso.
- 3.- La obtención de polinomios de grado mayor a tres debe hacerse con el auxilio de una computadora.
- 4.- Los polinomios pasan exactamente por los

puntos tabulares.

- 5.- Cuando se tienen dos valores iguales de X o de $f(X)$, el polinomio no se puede calcular, y en nuestro caso esto ocurre frecuentemente.

Por lo antes señalado recomendamos no buscar correlaciones polinomiales para relacionar escalas de electronegatividad, puesto que dichos polinomios no se pueden utilizar para hacer cálculos de inter o extrapolación.

B I B L I O G R A F I A

- 1.- Esparza F.H., Armas C. -Cálculo de electronegatividad del orbital máximo de valencia para 86 elementos. Trabajo presentado al IX Congreso Mexicano de Química Pura y Aplicada. Mayo (1974).

- 2.- Análisis numérico elemental.
S.D. Conte y Carl de Boor.
McGraw-Hill (1977).

Conclusiones.

- 1.- Como es fácilmente apreciable en cualquiera de las gráficas que el presente trabajo contiene, las correlaciones resultan más exactas si se toman por periodos de elementos, y por lo tanto, el obtener una correlación general (sólo una ecuación para todos los elementos) implica necesariamente una linealidad baja, -- tal y como ocurre con la ecuación:

$$X_p = (0.21X_s + 0.77)$$

que aparece en la página 65 del libro Periodicidad Química de R.T. Sanderson, Ed. Aguilar 1964.

- 2.- Los periodos segundo y tercero, independientemente de la función de correlación, presentan una tendencia lineal casi perfecta.
- 3.- Los periodos cuarto, quinto y sexto, en términos generales, presentan una baja - tendencia lineal.
- 4.- Al correlacionar la posición del átomo - (número atómico Z) con una propiedad del

mismo (X_{autor}), se observa para los períodos segundo y tercero, en todos los casos una linealidad muy parecida; por lo que podemos decir que debe existir una relación muy estrecha entre las diferentes propiedades de los átomos, por lo que, en relación al concepto "electronegatividad" se puede afirmar:

- a).- que sigue la Ley Periódica de Mendeleev.
- b).- que se puede utilizar con confianza para calcular (conocido el valor de electronegatividad) el valor de las propiedades con que se relaciona.
- c).- que su relación con otras propiedades reafirma su utilidad para explicar cualitativa y cuantitativamente ciertas propiedades fisicoquímicas de la materia.

En otras palabras, la fuerza de atracción F (Allred-Rochow), la función trabajo ϕ (Gordy), el potencial de ión

nización P.I. y la afinidad electrónica A.E. (Mulliken), el calor de --- reacción H_r (Pauling), la densidad electrónica D.E. (Sanderson); son manifestaciones diferentes de la misma--- propiedad atómica, a la cual Pauling llamó "electronegatividad".

5.- Uno de los objetivos de este trabajo es proponer los valores de electronegatividad para aquellos elementos, de las diferentes escalas, que no tienen valor--- calculado, por lo que, para seleccionar los mejores valores es necesario analizar las siguientes consideraciones:

a).- El valor de electronegatividad--- que se obtiene de la gráfica correspondiente y que muestre a simple vista mayor linealidad.

b).- El valor de electronegatividad - obtenido de la ecuación correspondiente que muestre el mayor coeficiente - de correlación "r".

c).- El valor de electronegatividad -

promedio obtenido de las cuatro formas diferentes, expuestas en las últimas tablas.

a).- El valor de electronegatividad-- obtenido directamente de la lectura de la gráfica.

Este valor depende de: la amplitud de las escalas utilizadas, la exactitud con que se colocaron los puntos tabulares, la apreciación subjetiva de--- quien lee. Por estas razones, resulta que usualmente cada persona obtiene-- un valor diferente de $f(X)$ para el--- mismo valor de X ; y por lo tanto, el método gráfico, para nuestro caso, no lo consideramos adecuado.

b).- El valor de electronegatividad-- de la ecuación obtenido de la ecua--- ción con mayor coeficiente de correlación " r ".

Debido a que " r " indica solamente si la relación entre dos variables es li-

neal, no significa necesariamente que la ecuación de correlación que tenga el mayor coeficiente de correlación " r " sea la que mejor se ajusta a los puntos tabulares; por ejemplo, en un caso donde todos los puntos tabulares menos uno coinciden sobre una recta, el valor de r es sumamente alto pues existe gran linealidad; pero la ecuación obtenida no pasa por los $n-1$ puntos tabulares, sino que ajusta sus parámetros, pendiente m y ordenada al origen b , de manera que la desviación de los n puntos con respecto a esa recta es mínima. Por esta razón, los valores de electronegatividad obtenidos de la ecuación que tenga el mayor coeficiente de correlación " r ", tampoco los consideramos los más adecuados.

c).- Valor de electronegatividad promedio.

Cuando se efectúa una misma medición varias veces, se produce en cada ocasión un valor ligeramente diferente,-

puesto que el resultado de cada medición individual depende de la acción de un gran número de factores que varían durante esta medición, y por lo tanto, el resultado debe considerarse dependiente de la eventualidad, es decir, como una magnitud aleatoria. Estas magnitudes aleatorias están reguladas por las leyes de la probabilidad, y el error estadístico obtenido es inversamente proporcional a la raíz cuadrada del número de observaciones, es decir, que la exactitud de una medición aumenta con el número de mediciones.

En este caso se hace la medición de una misma propiedad (electronegatividad) de cuatro formas diferentes, por lo tanto, es más probable que el valor promedio de una medición sea un mejor valor de la propiedad, que el valor de una sola medición, por muy cuidadosamente que esta se determine.

Sustentados en el análisis anterior,-

proponemos que el valor de electronegatividad, que complete las distintas escalas, sea determinado por medio---del promedio de los cuatro valores---distintos ya obtenidos. Dichos valo---res propuestos son finalmente:

Escala Allred-Rochow.

Z	X_A
86	1.820

Escala Armas-Esparza.

Z	X_{OMV}
46	4.210

Escala Gordy.

Z	X_G
7	2.505
8	3.077
9	3.768
10	4.600
15	2.169
16	2.614
17	3.152

18	3.760
21	1.348
35	2.312
36	2.485
39	1.281
43	1.499
49	1.722
53	2.177
54	2.311
61	1.181
63	1.196
64	1.220
65	1.246
66	1.274
67	1.296
68	1.321
69	1.348
70	1.374
71	1.441
84	2.084
85	2.212
86	2.343

Escala Mulliken.

Z	X_M
10	4.558
18	3.448
28	1.756
36	2.804
39	0.842
40	0.932
41	0.994
42	1.087
43	1.222
44	1.277

45	1.374
46	1.444
54	2.908

Escala Pauling.

Z	X_p
10	4.954
18	3.691
61	1.163
63	1.171
65	1.234
70	1.401
86	2.646

Escala Sanderson.

Z	X_S
27	1.648
28	1.755
84	1.707
85	1.812
86	1.920

Y para dar por terminado el presente trabajo de tesis, presentamos todas las escalas de electronegatividad incluyendo los valores propuestos que complementan dichas escalas.

Z	x_A	x_{OMV}	x_G	x_M	x_P	x_S
03	00.970	00.508	00.900	00.840	00.980	00.860
04	01.470	01.768	01.300	01.400	01.570	01.610
05	02.010	04.021	02.000	01.930	02.040	01.880
06	02.500	08.378	01.800	02.480	02.550	02.470
07	03.040	14.174	2.505	02.280	03.040	02.930
08	03.500	22.181	3.077	03.040	03.440	03.460
09	04.100	32.702	3.733	03.900	03.980	03.920
10	05.100	45.957	4.600	4.558	4.954	04.380
11	01.010	00.855	00.900	00.740	00.930	00.850
12	01.230	02.022	01.400	01.170	01.310	01.420
13	01.470	02.362	01.500	01.640	01.610	01.540
14	01.740	03.757	01.700	02.250	01.900	01.740
15	02.050	05.786	2.169	01.840	02.190	02.160
16	02.440	08.355	2.614	02.280	02.580	02.660
17	02.830	11.640	3.152	02.950	03.150	03.280
18	03.300	15.575	3.760	3.488	3.691	03.320
19	00.910	00.748	00.800	00.770	00.820	00.740
20	01.040	01.784	01.100	00.990	01.000	01.060
21	01.200	01.879	1.138	01.580	01.360	01.090
22	01.320	02.208	01.700	01.320	01.540	01.130
23	01.450	02.538	01.700	01.190	01.630	01.240
24	01.560	02.430	01.800	02.720	01.660	01.350
25	01.600	03.235	01.600	01.290	01.550	01.440
26	01.640	03.609	01.800	01.380	01.830	01.470
27	01.700	03.998	01.700	01.960	01.830	1.648
28	01.750	04.402	02.000	1.756	01.910	1.755
29	01.750	04.119	01.800	01.360	01.900	01.740
30	01.660	05.259	01.500	01.490	01.650	01.860
31	01.820	03.956	01.600	01.820	01.810	02.100
32	02.020	05.707	01.900	02.500	02.010	02.310
33	02.180	07.434	02.100	02.580	02.180	02.530
34	02.480	09.834	01.900	02.180	02.550	02.760
35	02.740	12.470	2.312	02.620	02.960	02.960
36	03.100	15.457	2.465	2.804	02.900	03.470
37	00.890	00.953	00.800	00.500	00.820	00.700
38	00.990	01.801	00.900	00.850	00.950	00.960
39	01.110	02.183	1.281	0.824	01.220	00.980
40	01.220	02.540	01.500	0.932	01.330	01.000
41	01.230	02.652	01.600	0.994	01.600	01.120
42	01.300	03.019	01.700	1.087	02.160	01.240
43	01.370	03.735	1.499	1.222	01.900	01.330

Z	x_A	x_{OMV}	x_G	x_M	x_P	x_S
44	01.420	03.748	01.800	1.227	02.200	01.400
45	01.450	04.180	01.900	1.374	02.280	01.470
46	01.350	4.210	02.000	1.437	02.200	01.570
47	01.420	04.855	01.700	01.360	01.930	01.720
48	01.460	05.844	01.600	01.400	01.690	01.730
49	01.490	04.435	1.722	01.570	01.780	01.880
50	01.720	05.920	01.700	02.440	01.960	01.580
51	01.810	07.023	01.700	02.640	02.050	02.190
52	02.010	08.757	01.900	02.080	02.100	02.340
53	02.210	10.660	2.177	02.520	02.660	02.500
54	02.400	12.780	2.311	3.089	02.600	02.630
55	00.860	01.004	00.700		00.790	00.690
56	00.970	01.788	00.900		00.890	00.930
57	01.080	02.539	01.300		01.100	00.920
58	01.080	02.759	01.000		01.120	00.920
59	01.070	02.054	01.000		01.130	00.920
60	01.070	02.546	01.300		01.140	00.930
61	01.070	02.652	1.181		1.163	00.940
62	01.070	02.331	01.300		01.170	00.940
63	01.010	02.435	1.196		1.171	00.940
64	01.110	02.799	1.220		01.200	00.940
65	01.100	02.634	1.246		1.234	00.940
66	01.100	02.829	1.274		01.220	00.940
67	01.100	02.829	1.296		01.230	00.960
68	01.110	02.923	1.321		01.240	00.960
69	01.110	03.038	1.348		01.250	00.960
70	01.060	03.126	1.374		1.401	00.960
71	01.140	03.650	1.441		01.270	03.960
72	01.230	04.209	01.400		01.300	00.980
73	01.330	04.771	01.700		01.500	01.040
74	01.400	05.329	01.800		02.360	01.130
75	01.460	05.898	02.100		01.900	01.190
76	01.520	06.441	01.900		02.200	01.260
77	01.550	07.018	01.900		02.200	01.330
78	01.440	07.212	02.200		02.280	01.360
79	01.420	07.763	01.900	01.780	02.540	01.720
80	01.440	08.777	01.800	01.940	02.000	01.920
81	01.440	07.043	01.500		01.620	01.360
82	01.550	08.395	01.600		02.330	01.610
83	01.670	07.954	01.700		02.020	02.060
84	01.760	09.681	2.084		02.000	1.707
85	01.900	11.550	2.212		02.200	1.812
86	1.820	13.530	2.243		2.646	1.920