

Cotejo entre los datos que aparecen en el artículo y los producidos en el algoritmo

Castañeda Bagatella Diana Marlén

18 de noviembre de 2020

	#rAB	S12	T12	V11B	V12A	(11,22)	(11,12)	(12,12)
0	0.0	1.000000	0.500000	-1.000000	-1.000000	0.625000	0.625000	0.625000
1	1.0	0.858385	0.306567	-0.729329	-0.735759	0.554521	0.507045	0.436651
2	1.5	0.725173	0.195239	-0.583688	-0.557826	0.490338	0.405369	0.296835
3	2.0	0.586453	0.112779	-0.472527	-0.406006	0.425974	0.308036	0.184156
4	2.5	0.458308	0.058144	-0.390567	-0.287298	0.368388	0.225595	0.106622
5	3.0	0.348509	0.024894	-0.330028	-0.199148	0.319804	0.160742	0.058508
6	3.5	0.259194	0.006289	-0.284542	-0.135888	0.279947	0.112156	0.030766
7	5.0	0.096577	-0.007848	-0.199945	-0.040428	0.199569	0.034953	0.003717
8	7.0	0.022189	-0.003805	-0.142856	-0.007295	0.142845	0.006538	0.000168

Figura 1: En esta tabla se muestran los valores del artículo.[1]

	#rAB	S12	T12	V11B	V12A	(11,22)	(11,12)	(12,12)
0	0.0	1.000000	0.500000	-1.000000	-1.000000	0.625000	0.625000	0.625000
1	1.0	0.858385	0.306566	-0.729329	-0.735759	0.554521	0.520814	0.436655
2	1.5	0.725173	0.195239	-0.583688	-0.557825	0.490337	0.408246	0.296837
3	2.0	0.586453	0.112779	-0.472527	-0.406006	0.425974	0.308639	0.184157
4	2.5	0.458308	0.058143	-0.390567	-0.287297	0.368388	0.225722	0.106622
5	3.0	0.348509	0.024893	-0.330028	-0.199148	0.319803	0.160769	0.058508
6	3.5	0.259194	0.006291	-0.284542	-0.135888	0.279944	0.112162	0.030766
7	5.0	0.096577	-0.007861	-0.199946	-0.040428	0.199569	0.034953	0.003717
8	7.0	0.022189	-0.003800	-0.142856	-0.007295	0.142845	0.006538	0.000168

Figura 2: En esta tabla se encuentran los datos calculados.

	#rAB	S12	T12	V11B	V12A	(11,22)	(11,12)	(12,12)
0	NaN	0.000000	0.000000	162.5000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
1	0.0	0.000000	0.000326	0.0000	0.000000	0.000000	2.715538	0.000916
2	0.0	0.000000	0.000000	0.0000	0.000179	0.000204	0.709724	0.000674
3	0.0	0.000000	0.000000	0.0000	0.000000	0.000000	0.195756	0.000543
4	0.0	0.000000	0.000860	0.0000	0.000348	0.000000	0.056296	0.000000
5	0.0	0.000000	0.002009	0.0000	0.000000	0.000313	0.016797	0.000342
6	0.0	0.000000	0.033710	0.0000	0.000000	0.001072	0.005350	0.000650
7	0.0	0.000207	0.164883	0.0005	0.000742	0.000000	0.000286	0.001076
8	0.0	0.000451	0.144284	0.0000	0.000822	0.000000	0.001988	0.238095

Figura 3: En esta tabla se muestra el error relativo, calculado a partir de la tabla del artículo [1] y la tabla calculada.

Referencias

- [1] Micheal J. S. Dewar y Jozsef Kelemen. "LCAO MO theory illustrated by its application to H₂". En: *Journal of Chemical Education* 48.8 (1971), pág. 494. DOI: 10.1021/ed048p494. eprint: <https://doi.org/10.1021/ed048p494>. URL: <https://doi.org/10.1021/ed048p494>.