

EL UMBRAL DE INESTABILIDAD ANIÓNICA EN ÁTOMOS

THE ANIONIC INSTABILITY THRESHOLD IN ATOMS

DARIO A. LEÓN VALIDO^a, GABRIEL GIL^b Y AUGUSTO GONZÁLEZ^{b†}

a) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba

b) Instituto de Cibernética, Matemática y Física, La Habana, Cuba; agonzale@icimaf.cu[†]

† autor para la correspondencia

Recibido 16/9/2014; Aceptado 8/1/2016

En este trabajo se estima el umbral de carga nuclear, Z_c , por debajo del cual el átomo se vuelve inestable. Para ello se utiliza un procedimiento de interpolación, desarrollado por Kais y colaboradores, basado en una ecuación de Schrödinger efectiva para el electrón más externo. Los resultados son comparados con valores obtenidos de un modelo nuestro de fuerzas de radio nulo, que tiene como parámetros de entrada los datos experimentales del radio covalente y la electroafinidad.

In this work is estimated the nuclear charge threshold, Z_c , at which an atom turns unstable. In order to achieve it, an interpolation procedure based on an effective Schrödinger equation for the most external electrons is used. The results are compared with our own force model for null radius, where the input parameters are the experimental values for the covalent radius and electroaffinity.

PACS: Atomic ions 32.30.-r; anionic instability threshold 32.10.Hq; binding energy 31.15.-p

I. INTRODUCCIÓN

La carga eléctrica de los electrones y protones está cuantizada. Como consecuencia, la carga nuclear, Z , sólo puede tomar valores enteros. Sin embargo, en ocasiones, imaginar Z como un parámetro libre puede conducirnos a una dinámica simplificada a partir de la cual podemos aprender acerca de la física de los átomos reales. Por ejemplo, en el marco de la Mecánica Cuántica no relativista podemos tomar el límite de Z grandes, en el cual los electrones se mueven aproximadamente libres en el campo nuclear y la repulsión de Coulomb mutua puede tomarse en cuenta por teoría de perturbaciones. Por otra parte, si consideramos el límite opuesto y comenzamos a disminuir la carga, rápidamente encaramos un umbral de inestabilidad, $Z = Z_c$, por debajo del cual el átomo se ioniza espontáneamente, emitiendo un electrón. Se ha probado que la carga nuclear crítica está muy cerca de la carga nuclear del anión simplemente cargado [1], $Z_c \lesssim N - 1$, donde N es el número de electrones. En efecto, no se han encontrado aniones doblemente cargados estables en experimentos ni en cálculos teóricos [2].

La búsqueda de estos aniones ha estimulado el cálculo de Z_c , entendido como un parámetro real (no entero). Existen cálculos de primeros principios para átomos pequeños ($N \leq 18$) [3]. La extensión a átomos más grandes hace uso de una ecuación de Schrödinger efectiva para el electrón más externo, diseñada para ajustar el potencial de ionización del átomo neutro ($Z = N$) y la electroafinidad del anión ($Z = N - 1$) [1]. Notar que tanto el potencial de ionización como la electroafinidad son magnitudes que caracterizan al átomo multielectrónico. La ecuación de Schrödinger efectiva para el último electrón hay que entenderla más como un procedimiento de extrapolación para hallar Z_c que como una descripción exacta del último orbital ocupado.

En el presente trabajo comprobamos y completamos los cálculos reportados en la Ref. [1] y los comparamos con resultados provenientes de un modelo nuestro [4], basado en la teoría de fuerzas de radio nulo [5], para calcular la pendiente de la curva de energía de enlace del último electrón en $Z = N - 1$. Este modelo usa el radio covalente y la electroafinidad del átomo neutro con $N - 1$ electrones [6] como parámetros de entrada. Reportamos Z_c para todos los elementos de la tabla periódica que tienen un anión estable.

Además, con el objetivo de comprobar la validez del modelo de fuerzas de radio nulo, estimamos el potencial de ionización de átomos neutros y lo comparamos con datos experimentales [7].

II. VALORES DE Z_c A PARTIR DEL PROCEDIMIENTO DE INTERPOLACIÓN DE KAIS

Sergeev y Kais [1] usaron el siguiente Hamiltoniano:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} + \frac{N-1}{r} (1 - e^{-\delta r}), \quad (1)$$

para describir de manera efectiva al electrón más externo en un átomo multielectrónico. El potencial que ellos emplearon es el llamado potencial de Hellman (Coulomb + Yukawa), que reproduce correctamente los dos límites de corto y largo alcance. Para $r \rightarrow \infty$, el electrón se mueve en el campo coulombiano de un núcleo efectivo (el núcleo atómico rodeado por electrones internos) con carga efectiva $Z_{ef} = Z - N + 1$. Por otra parte, para $r \rightarrow 0$, el electrón interactúa con el campo nuclear atractivo $V(r) = -Z/r$.

Reescalando las coordenadas electrónicas $r \rightarrow r/Z$, obtenemos un nuevo Hamiltoniano:

$$\hat{h} = \frac{\hat{H}}{Z^2} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{r} + \frac{g}{r} (1 - e^{-\delta r}), \quad (2)$$

donde $g = (N - 1)/Z$ y $\delta \rightarrow \delta Z$. La ecuación de Schrödinger para el electrón que ocupa la órbita más externa, $\chi(r)$, puede ser escrita como $H|\chi\rangle = E_b|\chi\rangle$, donde E_b es la energía del electrón en el estado $|\chi\rangle$. El reescalamiento transforma la última ecuación en $h|\chi\rangle = \epsilon_b|\chi\rangle$, donde $\epsilon_b = E_b/Z^2$. El problema característico puede expresarse en forma matricial usando una base de funciones y la matriz puede ser diagonalizada mediante el álgebra numérica tradicional.

Así, definimos los elementos de matriz:

$$h_{\alpha\beta} = \langle \phi_\alpha | \hat{h} | \phi_\beta \rangle = \int_0^\infty \phi_\alpha(r) \hat{h} \phi_\beta(r) r^2 dr, \quad (3)$$

y la matriz de solapamiento:

$$S_{\alpha\beta} = \langle \phi_\alpha | \phi_\beta \rangle = \int_0^\infty \phi_\alpha(r) \phi_\beta(r) r^2 dr. \quad (4)$$

En general, la base de funciones no tiene que ser ortonormal, lo que conduce a un problema generalizado de autovalores y autovectores:

$$\sum_\beta h_{\alpha\beta} C_\beta = \epsilon \sum_\beta S_{\alpha\beta} C_\beta, \quad (5)$$

donde los coeficientes $\{C_\alpha\}$ se definen por:

$$|\chi\rangle = \sum_\alpha C_\alpha |\phi_\alpha\rangle. \quad (6)$$

Las funciones base deben satisfacer:

$$\phi_\alpha(r)|_{r=0} = 0, \quad (7)$$

y deben ser cuadrado integrable. Resulta conveniente escogerlas en la forma:

$$\phi_\alpha(r) = N_\alpha r^{l+1} e^{-\alpha r}, \quad (8)$$

donde:

$$N_\alpha = \frac{(2\alpha)^{l+3/2}}{\sqrt{(2l+2)!}}. \quad (9)$$

En nuestros cálculos tomamos α en la secuencia $5/i$, $i = 1, \dots, D$, y variamos D entre 300 y 800 en dependencia de la rapidez de convergencia de cada autovalor.

El hamiltoniano \hat{h} tiene autovalores cercanos a cero y autofunciones con varios nodos, lo cual conduce a inestabilidades numéricas a la hora de representarlo como una matriz y diagonalizarlo. Para resolverlas utilizaremos un algoritmo muy efectivo, aunque poco conocido [8]:

1. Se generan aleatoriamente $d \ll D$ vectores \vec{x}_I .
2. Se crea un nuevo conjunto de vectores mediante la operación $\vec{y}_I = h\vec{x}_I$.

3. Se obtiene una base ortonormal $\{\vec{z}_I\}$, aplicando el método de Gram-Schmidt a los vectores $\{\vec{y}_I\}$.
4. Se representan h y S en la base $\{\vec{z}_I\}$, $I = 1, \dots, d$.
5. Se soluciona el problema generalizado de autovalores dado por la Ec. (5).

El nuevo problema está libre de falsos autovalores. La razón de semejante comportamiento viene dada por la uniformidad de la distribución de vectores aleatorios en un dominio. El kernel de la aplicación lineal es dimensionalmente menor que el espacio original, por tanto, la probabilidad de que algún vector \vec{y}_I pertenezca al kernel es muy pequeña.

En la práctica tomamos la cantidad de vectores d entre 20 y 50.

Procediendo de esa manera, hallamos los autovalores de h con mucha más exactitud que en la Ref. [1]. Además, consideramos átomos no estudiados en ese trabajo.

Como se mencionó anteriormente, los autovalores de \hat{H} determinan la energía del electrón más externo. Cuando $Z = N$ (átomo neutro), esa energía es igual a *menos* el potencial de ionización del átomo, $E_b = -I_p$. Entonces, en $Z = N$, ajustamos el parámetro δ a un valor δ_0 que garantice que $E_b = -I_p$. De la misma manera, cuando $Z = N - 1$ (el anión), E_b debe ser igual a la electroafinidad del átomo con $N - 1$ electrones, $E_b = -E_a$ y debemos encontrar el parámetro δ_1 para el cual se cumpla esa igualdad.

Para determinar Z_c , definida como la Z para la cual $E_b = 0$, usaremos una extrapolación para δ como función de Z . Seguimos la misma receta dada por Kais en la Ref. [1], que consiste en postular δ como una función lineal de la variable $\gamma = (N - 1)/Z$:

$$\delta(Z) = \delta_1 + N(\gamma - 1)(\delta_1 - \delta_0). \quad (10)$$

III. VALORES DE Z_c A PARTIR DEL MODELO DE FUERZAS DE RADIO NULO

En nuestro modelo de fuerzas de radio nulo [4], partimos de una expresión muy similar a la Ec. (2):

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \Theta(r - R) \frac{\alpha}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right\} \chi(r) = E_b \chi(r), \quad (11)$$

donde $V(r)$ da cuenta de la interacción de corto alcance de los electrones con el núcleo efectivo. Su radio efectivo, R , debe ser similar al del átomo de $N - 1$ electrones. La interacción coulombiana de largo alcance actúa solamente para $r > R$, Θ es la función paso unitario, y exhibe una carga efectiva $-\alpha = Z - (N - 1)$. l es el momento angular del orbital externo. Nótese que $\alpha = -1$ corresponde al átomo neutro ($Z = N$), mientras el anión ($Z = N - 1$) está asociado al valor $\alpha = 0$.

En términos rigurosos, es conocido [9] que, bajo la suposición $N - 2 < Z_c < N - 1$, la dependencia de E_b con Z es lineal cerca de Z_c . La afirmación anterior es consecuencia del hecho de que $\phi_e(r)$ permanece normalizado en el umbral ($\chi(r) \sim \exp -2\sqrt{\alpha_c}r$). La pendiente de la curva en Z_c puede ser calculada con ayuda del teorema de Feynman-Hellman

como $-\langle\phi_e|\Theta(r-R)1/r|\phi_e\rangle/\langle\phi_e|\phi_e\rangle$. El caso $Z_c = N - 1$, o sea $E_a(N - 1) = 0$, es especial y requiere un tratamiento diferente.

Podemos calcular la pendiente de la curva no en Z_c , sino cuando $\alpha = 0$ y el núcleo es estrictamente neutral. En ese caso $V(r)$ soporta un estado ligado en $-E_a$ y $\chi(r)$ para largas distancias se comporta como:

$$\chi(r) \sim \exp(-\kappa r), \quad (12)$$

donde $\kappa = \sqrt{2E_a}$. El término dependiente de l en la Ec. (12) produce correcciones que decaen aún más rápido con r .

Usamos la Ec. (12) para calcular la pendiente. Esto corresponde a un modelo de teoría de fuerzas de radio nulo que, en principio, debe ser válida cuando el radio efectivo de $\chi(r)$, $1/\sqrt{2E_a}$, sea mayor que R . Los detalles de la función de onda para $r < R$ no son importantes. Para la pendiente obtenemos:

$$s = \left. \frac{dE_b}{dZ} \right|_{Z=N-1} = -\frac{\int_R^\infty dr e^{-2\kappa r}/r}{\int_R^\infty dr e^{-2\kappa r}}. \quad (13)$$

Hacemos uso de la dependencia aproximadamente lineal de E_b con Z en la vecindad del anión ($Z \approx N - 1$) para estimar Z_c . En $Z = N - 1$, la energía es $E_b = -E_a$, mientras la pendiente está dada por la Ec. (13), entonces:

$$E_b \approx -E_a - s(N - Z - 1). \quad (14)$$

La carga nuclear crítica, Z_c , es la carga para la cual $E_b = 0$. Si escribimos $Z_c = N - 1 - g_c$, entonces para g_c obtenemos:

$$g_c \approx -\frac{E_a}{s}. \quad (15)$$

A continuación, se compara la estimación dada por la Ec. (15) con los números provenientes de la interpolación de Kais. Los resultados se muestran en la Tabla 1 y gráficamente en la Fig. 1. Puede observarse que la concordancia es buena a pesar de la simplicidad de la Ec. (15).

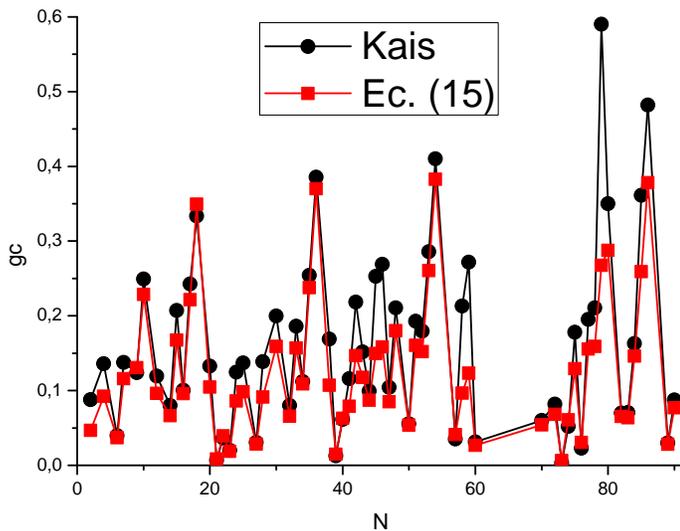


Figura 1. Valores de g_c calculados de acuerdo con el esquema de Kais y según el modelo de fuerzas de radio nulo, Ec. (15).

IV. DISCUSIÓN

Hemos incluido en la Tabla 1 todos los valores calculados así como los datos utilizados para hallarlos. En la práctica nos dimos cuenta de que los autovalores de h eran muy sensibles a los parámetros d y D escogidos para un elemento en particular. Muchos de los valores reportados por Kais difieren de los valores, mucho más precisos, calculados por nosotros. Resaltamos la inestabilidad de los δ_1 de los elementos yterbio, wolframio y plomo.

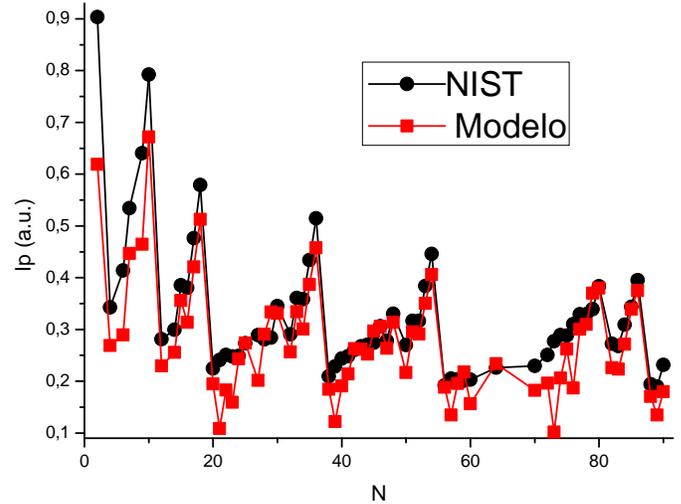


Figura 2. Comparación entre los potenciales reportados por el NIST [7] y las estimaciones a partir del modelo de fuerzas de radio nulo, Ec. (16).

Analizando las desviaciones más notables, podemos notar que en los aniones con $N = 30, 38, 42, 45, 75, 77, 79$ y $80, 85, 86$ las condiciones de validez del modelo de fuerzas de radio nulo no se dan. En efecto, en estos casos $R \lesssim 1/\sqrt{2E_a}$. El caso del oro ($N = 79$) presenta grandes desviaciones de la linealidad en la extrapolación ya que $R > 1/\sqrt{2E_a}$. En otros aniones, como el paladio ($N = 46$), además de cumplirse que $R \lesssim 1/\sqrt{2E_a}$, el orbital más externo es dudoso, obteniéndose convergencia para el orbital 4d y ninguna para el 5s. También ocurre en el praseodimio ($N = 59$), donde hay convergencia para el 4f y no para el 5d, y para el platino ($N = 78$), convergiendo el 5d y no el 6s. Como casos extremos tenemos los elementos cobre, bario, gadeolinio y radio, $N = 29, 56, 64$ y 88 , respectivamente, para los cuales no se encontró ningún intercepto. Esta es una de las deficiencias del algoritmo de Kais y pensamos que está relacionada con la forma en que se escoge la interpolación lineal.

V. POTENTIAL DE IONIZACIÓN A PARTIR DEL MODELO DE FUERZAS DE RADIO NULO

Como una verificación cualitativa de la validez de nuestro modelo, extrapolamos la dependencia lineal dada por Ec. (14) hasta $Z = N$ para estimar el potencial de ionización de átomos neutros y comparamos esos valores con datos experimentales [7]. La hipótesis es que la electroafinidad y el radio covalente del átomo con $N - 1$ electrones determinan el

potencial de ionización del átomo con N electrones mediante de la expresión:

$$I_p = E_a - s. \quad (16)$$

La comparación se encuentra en la Fig. 2. Es evidente que se reproduce la dependencia cualitativa de I_p con N con esta simple expresión, aunque notamos desviaciones.

El hecho de que I_p puede ser reproducido cualitativamente por la dependencia lineal de E_b con Z que viene del umbral de inestabilidad aniónica, puede ser entendido como una indicación de que, al menos considerando esta propiedad, el régimen físico bajo el cual los átomos neutros operan está más cerca del umbral de inestabilidad que del régimen de valores grandes de Z descrito por la teoría de Thomas-Fermi [10–12].

VI. CONCLUSIONES

En el trabajo recalculamos, con mucha mayor exactitud, los valores umbrales de carga nuclear, a partir del procedimiento de Kais, para casi todos los elementos de la tabla periódica. Encontramos buena concordancia con un modelo simple basado en la teoría de fuerzas de radio nulo. Debido a deficiencias inherentes al método de Kais, en algunos casos no existe solución para Z_c . El modelo de fuerzas de radio nulo también nos proporciona estimaciones del potencial de ionización que, aunque no muy precisas, reproducen cualitativamente sus valores.

REFERENCES

- [1] A.V. Sergeev and S. Kais, *Int. J. Quant. Chem.* 75, 533 (1999); S. Kais and P. Serra, *Int. Rev. Phys. Chem.* 19, 97 (2000).
- [2] K.H. Chang, R.D. McKeown, R.G. Milner and J. Labrenz, *Phys. Rev. A* 35 (9), 3949 (1987); A. Dreuw and L.S. Cederbaum, *Chem. Rev.* 102, 181 (2002); Q. Wei, S. Kais and N. Moiseyev, *J. Chem. Phys.* 124, 201108 (2006).
- [3] H. Hogreve, *J. Phys. B* 31, L439 (1998).
- [4] G. Gil and A. González, *Mod. Phys. Lett. B* 27, 1350178 (2013).
- [5] H. A. Bethe, *Phys. Rev.* 76, 38-50 (1949); L.D. Landau and Ya.A. Smorodinsky, *Lectures on Nuclear Theory*, (Plenum Press, New York), 1959.
- [6] Royal Society of Chemistry website <http://www.rsc.org/periodic-table/>. Data References: W.M. Haynes (ed.) *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press, Boca Raton, 2011; G.W.C. Kaye and T.H. Laby, *Tables of Physical and Chemical Constants*, Longman, Essex, 1995.
- [7] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader and NIST ASD Team (2012). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.0), [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [2013, March 4]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
- [8] N. Halko, P.G. Martinsson and J.A. Tropp (eds.), *Finding structure with randomness: probabilistic algorithms for constructing approximate matrix decompositions*.
- [9] D.K. Gridnev, *J. Math. Phys.* 53, 102108 (2012).
- [10] L.H. Thomas, *Proc. Camb. Phil. Soc.* 23, 542 (1927); E. Fermi, *Rend. Accad. Naz. Lincei* 6, 602 (1927).
- [11] D.A. Kirzhnits, Yu.E. Lozovik and G.V. Shpatakovskaya, *Sov. Phys. Usp.* 18, 649 (1975); E.H. Lieb, *Rev. Mod. Phys.* 53, 603 (1981); L. Spruch, *Rev. Mod. Phys.* 63, 1512 (1991).
- [12] R. Carcasses, A. Gonzalez, *Phys. Rev. A* 80, 024502 (2009).

Tabla 1. Valores de g_c

| N | Átomo neutro | nl | $I_p(N)$ | $E_a(N-1)$ | $R_{cov}(N-1)$ | δ_0 | δ_1 | $g_c(Kais)$ | $g_c(Modelo)$ |
|----|--------------|------|----------|------------|----------------|------------|------------|-------------|---------------|
| 2 | He | 1s | 0.903568 | 0.027706 | 0.604712 | 1.06656 | 0.880902 | 0.08761 | 0.046857 |
| 4 | Be | 2s | 0.342602 | 0.022705 | 2.45664 | 0.338749 | 0.258051 | 0.13588 | 0.0921681 |
| 6 | C | 2p | 0.413808 | 0.010276 | 1.58737 | 0.255266 | 0.217481 | 0.03951 | 0.0367817 |
| 7 | N | 2p | 0.53412 | 0.046366 | 1.41729 | 0.241772 | 0.212598 | 0.13761 | 0.115729 |
| 9 | F | 2p | 0.640276 | 0.053676 | 1.4173 | 0.238997 | 0.214998 | 0.12388 | 0.1307 |
| 10 | Ne | 2p | 0.792481 | 0.124985 | 1.13384 | 0.231808 | 0.211304 | 0.24942 | 0.228429 |
| 12 | Mg | 3s | 0.280993 | 0.020129 | 3.02356 | 0.161571 | 0.129974 | 0.11936 | 0.096117 |
| 14 | Si | 3p | 0.299568 | 0.015901 | 2.34326 | 0.128333 | 0.111452 | 0.08018 | 0.0663544 |
| 15 | P | 3p | 0.385378 | 0.051082 | 2.15429 | 0.122911 | 0.109656 | 0.2073 | 0.167552 |
| 16 | S | 3p | 0.380723 | 0.027452 | 2.0598 | 0.123711 | 0.111125 | 0.10052 | 0.0959167 |
| 17 | Cl | 3p | 0.47655 | 0.076328 | 1.96532 | 0.119793 | 0.10929 | 0.24248 | 0.221698 |
| 18 | Ar | 3p | 0.579154 | 0.132775 | 1.88973 | 0.116817 | 0.107827 | 0.33353 | 0.349367 |
| 20 | Ca | 4s | 0.224654 | 0.018422 | 3.77945 | 0.0896538 | 0.0747888 | 0.13283 | 0.104488 |
| 21 | Sc | 3d | 0.24113 | 0.000902 | 3.28812 | 0.0994536 | 0.091335 | 0.00661 | 0.00837266 |
| 22 | Ti | 4p | 0.250644 | 0.006906 | 3.00467 | 0.0751813 | 0.0675302 | 0.03634 | 0.0392541 |
| 23 | V | 4s | 0.247682 | 0.002902 | 2.72121 | 0.0887703 | 0.0774278 | 0.0201 | 0.0185436 |
| 24 | Cr | 4s | 0.248664 | 0.019287 | 2.72121 | 0.0893302 | 0.075405 | 0.12476 | 0.0861601 |
| 25 | Mn | 4s | 0.273195 | 0.024467 | 2.45664 | 0.0871282 | 0.0751374 | 0.13679 | 0.0981606 |
| 27 | Co | 4s | 0.289008 | 0.005547 | 2.34326 | 0.0866901 | 0.0771917 | 0.0304 | 0.0283189 |
| 28 | Ni | 4s | 0.28067 | 0.02432 | 2.22988 | 0.0879597 | 0.0755517 | 0.1386 | 0.0914276 |
| 29 | Cu | - | 0.284091 | 0.042467 | 2.21098 | - | - | - | 0.145687 |
| 30 | Zn | 4s | 0.34523 | 0.045369 | 2.30547 | 0.0839355 | 0.0746769 | 0.1998 | 0.158876 |
| 32 | Ge | 4p | 0.290298 | 0.015797 | 2.32436 | 0.0744514 | 0.0675142 | 0.0801 | 0.0656484 |
| 33 | As | 4p | 0.360702 | 0.045312 | 2.26767 | 0.0727149 | 0.0669925 | 0.1859 | 0.156828 |
| 34 | Se | 4p | 0.358393 | 0.029546 | 2.26767 | 0.0728253 | 0.0673034 | 0.112 | 0.108935 |
| 35 | Br | 4p | 0.434149 | 0.07427 | 2.22988 | 0.0714816 | 0.0666582 | 0.2541 | 0.237729 |
| 36 | Kr | 4p | 0.514475 | 0.123625 | 2.21098 | 0.0703766 | 0.0661007 | 0.3855 | 0.370198 |
| 38 | Sr | 5s | 0.20928 | 0.017851 | 4.06291 | 0.0572689 | 0.0489165 | 0.1688 | 0.107195 |
| 39 | Y | 4d | 0.22848 | 0.001763 | 3.59048 | 0.0618596 | 0.0580956 | 0.0126 | 0.0146824 |
| 40 | Zr | 5p | 0.243789 | 0.011278 | 3.32592 | 0.0489302 | 0.0449523 | 0.0615 | 0.0629191 |
| 41 | Nb | 4d | 0.248381 | 0.01565 | 3.09915 | 0.0616025 | 0.0580299 | 0.1159 | 0.0789891 |
| 42 | Mo | 5s | 0.260642 | 0.03366 | 2.94797 | 0.0546169 | 0.048524 | 0.2183 | 0.146803 |
| 43 | Tc | 5s | 0.267533 | 0.027479 | 2.759 | 0.054444 | 0.0487636 | 0.1518 | 0.117507 |
| 44 | Ru | 5s | 0.270491 | 0.020205 | 2.60782 | 0.0544572 | 0.0490558 | 0.0995 | 0.0870286 |
| 45 | Rh | 5s | 0.274107 | 0.038573 | 2.57003 | 0.0544381 | 0.048529 | 0.2529 | 0.149434 |
| 46 | Pd | 4d | 0.306373 | 0.041769 | 2.53223 | 0.0610524 | 0.0579478 | 0.269 | 0.158348 |
| 47 | Ag | 5s | 0.278419 | 0.020646 | 2.45664 | 0.0545197 | 0.049139 | 0.1042 | 0.0850949 |
| 48 | Cd | 5s | 0.330514 | 0.047831 | 2.57003 | 0.0528306 | 0.0484431 | 0.21075 | 0.180024 |
| 50 | Sn | 5p | 0.269882 | 0.011021 | 2.68341 | 0.0486205 | 0.0450347 | 0.0554 | 0.0535555 |
| 51 | Sb | 5p | 0.31635 | 0.040853 | 2.64562 | 0.0479284 | 0.044718 | 0.1928 | 0.160387 |
| 52 | Te | 5p | 0.31635 | 0.038426 | 2.64562 | 0.0479494 | 0.0447569 | 0.1795 | 0.152111 |
| 53 | I | 5p | 0.384074 | 0.072433 | 2.58893 | 0.0471871 | 0.0444753 | 0.2858 | 0.260385 |
| 54 | Xe | 5p | 0.445763 | 0.112416 | 2.57003 | 0.0466429 | 0.0441987 | 0.4102 | 0.38275 |
| 56 | Ba | - | 0.191525 | 0.017346 | 3.89284 | - | - | - | 0.101352 |
| 57 | La | 6p | 0.204948 | 0.005313 | 4.49755 | 0.0347671 | 0.0320993 | 0.035 | 0.0410757 |
| 58 | Ce | 5d | 0.20354 | 0.017266 | 3.66607 | 0.0422375 | 0.0399643 | 0.2131 | 0.096666 |
| 59 | Pr | 4f | 0.201115 | 0.023887 | 3.4771 | 0.0514056 | 0.0498041 | 0.2719 | 0.123088 |
| 60 | Nd | 4f | 0.203039 | 0.004042 | 3.21253 | 0.0513798 | 0.0498267 | 0.0314 | 0.0265335 |
| 64 | Gd | - | 0.226001 | 0.03174 | 3.4582 | - | - | - | 0.157018 |
| 70 | Yb | 6s | 0.229826 | 0.009334 | 3.34482 | 0.0384963 | 0.0346345 | 0.06 | 0.0539257 |
| 72 | Hf | 5d | 0.250817 | 0.0124902 | 3.28812 | 0.0417663 | 0.0399962 | 0.0818 | 0.0680206 |
| 73 | Ta | 5d | 0.277442 | 0.000625 | 3.09915 | 0.0416742 | 0.040023 | 0.003 | 0.00618139 |
| 74 | W | 6s | 0.288997 | 0.011829 | 2.98577 | 0.0370387 | 0.0346 | 0.052 | 0.0609043 |
| 75 | Re | 5d | 0.287874 | 0.029987 | 2.83459 | 0.0416187 | 0.0399625 | 0.17802 | 0.129126 |
| 76 | Os | 5d | 0.310099 | 0.0055106 | 2.66451 | 0.0415495 | 0.0400132 | 0.0229 | 0.03039 |
| 77 | Ir | 5d | 0.329532 | 0.04041 | 2.57003 | 0.0414911 | 0.0399456 | 0.1951 | 0.155556 |
| 78 | Pt | 5d | 0.329227 | 0.042482 | 2.49444 | 0.0414815 | 0.0399437 | 0.2106 | 0.158932 |
| 79 | Au | 5d | 0.339029 | 0.078203 | 2.45664 | 0.041449 | 0.0398813 | 0.59 | 0.267651 |

| N | Átomo neutro | nl | $I_p(N)$ | $E_a(N - 1)$ | $R_{cov}(N - 1)$ | δ_0 | δ_1 | $g_c(Kais)$ | $g_c(Modelo)$ |
|----|--------------|------|----------|--------------|------------------|------------|------------|-------------|---------------|
| 80 | Hg | 6s | 0.38357 | 0.084854 | 2.45664 | 0.0358649 | 0.0337561 | 0.3499 | 0.28766 |
| 82 | Pb | 6p | 0.272554 | 0.013855 | 2.72121 | 0.0340486 | 0.0320829 | 0.07 | 0.0653151 |
| 83 | Bi | 6p | 0.267735 | 0.013372 | 2.7401 | 0.034094 | 0.0320877 | 0.0705 | 0.063708 |
| 84 | Po | 6p | 0.309206 | 0.034619 | 2.83459 | 0.0337637 | 0.0319752 | 0.163 | 0.146162 |
| 85 | At | 6p | 0.343595 | 0.069824 | 2.68341 | 0.0335399 | 0.031818 | 0.36134 | 0.259107 |
| 86 | Rn | 6p | 0.394997 | 0.102898 | 2.7968 | 0.0332562 | 0.0316926 | 0.482 | 0.378102 |
| 88 | Ra | - | 0.193979 | 0.01786 | 4.57314 | - | - | - | 0.117075 |
| 89 | Ac | 7p | 0.189993 | 0.003675 | 3.98732 | 0.0258071 | 0.0240195 | 0.03 | 0.0280577 |
| 90 | Th | 6p | 0.231765 | 0.0128623 | 3.79835 | 0.0303461 | 0.0291417 | 0.0875 | 0.0770604 |