

Aplicación basada en realidad aumentada para la visualización de los  
modelos orbitales de los elementos químicos

Estiwar Martin Bello

Universidad pedagógica nacional

Facultad de Ciencia y Tecnología

Departamento de Tecnología

Licenciatura en Electrónica

Bogotá D.C., 2020

Aplicación basada en realidad aumentada para la visualización de los  
modelos orbitales de los elementos químicos

Estiwar Martin Bello

2013103932

Trabajo De Grado Para Optar Al Título De Licenciado en Electrónica

Director:

Diego Mauricio Rivera Pinzón M.ENG.

Universidad pedagógica nacional

Facultad de Ciencia y Tecnología

Departamento de Tecnología

Licenciatura en Electrónica

Bogotá D.C., 2020

Dedicado a:

Mi madre Irma Bello, quien me ha apoyado toda la vida, en mi formación como docente, acompañándome en este proceso académico, a mis hermanos y demás personas que me acompañaron.

## **Agradecimientos**

Al maestro Diego Mauricio Rivera, quien asesoró este trabajo, guiando, revisando los avances y el desarrollo del producto final. A los docentes del departamento de tecnología, así como a la Universidad Pedagógica Nacional, por todos los conocimientos y experiencias adquiridos en esta carrera.

### **GANADORES DEL PREMIO NOBEL – NUCLEAR**

#### **FÍSICA:**

La edición de los Sellos Nobel de 1982 ilustra el tema de la física nuclear y honra a cinco ganadores del Nobel Premio de Física. Fueron recompensados por su trabajo en el desarrollo de una nueva teoría atómica - mecánica cuántica. Los galardonados son:

NIELS BOHR, Dinamarca (1922)

ERWIN SCHRÖDINGER, Austria (1933)

LOUIS DE BROGLIE, Francia (1929)

PAUL DIRAC, Inglaterra (1933)

WERNER HEISENBERG, Alemania (1932).

## Resumen

En este documento se describe el diseño, desarrollo e implementación en Unity de una aplicación en realidad aumentada, para la visualización del modelo cuántico ondulatorio de los átomos, como trabajo de grado para optar por el título de licenciado en electrónica.

La aplicación muestra el modelo actual de los átomos centrándose en la representación en tres dimensiones de las teorías de orbitales, como figuras de probabilidad de hallar un electrón en un átomo, los tamaños de los átomos y las escalas entre los orbitales. De esta forma se realiza un diseño desde el punto de vista matemático, desarrollando cada parte desde las ecuaciones de probabilidad y forma de las funciones de onda de Schrödinger, así como de los datos obtenidos por distintos estudios como el tamaño de los átomos.

El diseño de cada orbital se plantea para representar las teorías actuales, así que éste se limita a los planteamientos de las teorías presentes, sin implicar a representar una novedad en cuanto a los modelos cuánticos, pero si en representar estas teorías en una plataforma que lo permita ver con mayor precisión y facilidad.

Esta aplicación se construye en el motor de videojuegos Unity, con el apoyo de la aplicación de código Visual Studio y el kit de desarrollo de realidad aumentada ARCore, para la plataforma Android se encuentra a través de “Google Play Services” para enumerados dispositivos compatibles con Android 7.0 o posterior; para dispositivos no compatibles, se encuentra por el navegador, requiriendo Android 8.1 o posterior, teniendo restricciones que no afectan al funcionamiento de esta aplicación.

## **Abstract**

This document describes the design, development, and implementation in Unity of an application in augmented reality, for the visualization of the wave quantum model of atoms, as a degree project to obtain a bachelor of Electronics.

The application shows the current model of atoms focusing on the three-dimensional representation of orbital theories, such as figures of probability of finding an electron in an atom, the sizes of atoms, and the scales between orbitals. In this way, a design is carried out from the mathematical point of view, developing each part from the equations of probability and form of the Schrödinger wave functions, as well as from the data obtained by different studies such as the size of the atoms.

The design of each orbital is proposed to represent current theories, so it is limited to the approaches of the present theories, without implying to represent a novelty in terms of quantum models, but to represent these theories on a platform that allow you to see more accurately and easily.

This application is built on the Unity video game engine, with the support of the Visual Studio code application and the ARCore augmented reality development kit, for the Android platform it is found through “Google Play Services” for listed devices compatible with Android 7.0 or later; For non-compatible devices, it is found by the browser, requiring Android 8.1 or later, having restrictions that do not affect the operation of this application.

## Tabla de contenido

<b>Resumen</b>	<b>III</b>
<b>Abstract</b>	<b>IV</b>
<b>1 Planteamiento</b>	<b>2</b>
1.1 Problema	2
1.2 Justificación	3
1.3 Objetivos	3
1.3.1 General	3
1.3.2 Específicos	3
1.4 Antecedentes	4
<b>2 Marco teórico</b>	<b>8</b>
2.1 Realidad aumentada	8
Marcadores:	8
Objetos tangibles:	8
Realidad Aumentada sin marcadores.	8
Geolocalización:	8
2.2 Modelo atómico	9
2.3 Modelo Cuántico-Ondulatorio	10
2.3.1 Orbitales atómicos	10
2.3.2 Números cuánticos	10
2.4 Átomos hidrogenoides	11
2.5 Átomos polielectrónicos	11
<b>3 Marco metodológico</b>	<b>13</b>

<b>4</b>	<b>Desarrollo</b>	<b>15</b>
4.1	Investigación	15
4.1.1	Ecuación de ondas de Schrödinger	15
4.2	Diseño	20
4.3	Matlab	21
4.4	GeoGebra	28
4.5	Tamaño de los átomos	30
4.6	Modelos	32
4.6.1	Parte angular	32
4.6.2	Parte radial	33
4.6.3	Consideraciones átomos polielectrónicos	41
4.7	Escenas	44
4.7.1	Principal	44
4.7.2	Inicio	48
<b>5</b>	<b>Resultados</b>	<b>50</b>
<b>6</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>55</b>
<b>7</b>	<b>Referencias</b>	<b>57</b>

### Tablas

Tabla 1. Funciones radiales.....	18
Tabla 2. Funciones angulares.....	19

### Imágenes



Fig. 1 Realidad aumentada para elementos de laboratorio .....	4
Fig. 2 Enlaces de átomos .....	5
Fig. 3 Modelo molecular tomando átomos como esferas .....	5
Fig. 4 Marcador y estructura molecular .....	6
Fig. 5 Modelo atómico por esferas. ....	6
Fig. 6 Modelo molecular por esferas .....	7
Fig. 7 Moléculas RA.....	7
Fig. 8 Diagrama de Moeller .....	10
Fig. 10 Coordenadas esféricas y cartesianas.....	16
Fig. 11 Esquema malla de coordenadas.....	20
Fig. 12 Orbital $l=0, m=0$ .....	22
Fig. 13 Orbitales $l=1, m=-1,0,1$ .....	22
Fig. 14 Orbitales $l=2, m=-2,-1,0,1,2$ .....	23
Fig. 15 Orbitales $l=3, m=-3,-2,-1,0,1,2,3$ .....	24
Fig. 16 Orbitales $s, p, d, f$ en Matlab .....	25
Fig. 17 MeshGenerator.cs.....	26
Fig. 18 MeshGenerator.cs .....	27
Fig. 19 Funciones de onda y de probabilidad radial para el orbital 1s .....	28
Fig. 20 Funciones de onda y de probabilidad radial para el orbital 2s .....	28
Fig. 21 Distribución radial de probabilidad .....	29

Fig. 22 Radio Atómico.....	31
Fig. 23 Orbitales $s, p, d, f$ en Unity .....	32
Fig. 24 Scripts MeshGenerator.cs y Atomos.cs.....	33
Fig. 25 Probabilidad en el modelo orbital 1s .....	34
Fig. 26 Probabilidad en el modelo orbital 2s .....	35
Fig. 27 Probabilidad en el modelo orbital 3s .....	35
Fig. 28 Probabilidad en el modelo orbital 4s .....	36
Fig. 29 Probabilidad en el modelo orbital 5s .....	36
Fig. 30 Probabilidad en el modelo orbital 6s .....	37
Fig. 31 Probabilidad en el modelo orbital 7s .....	37
Fig. 32 Probabilidad en el modelo orbital 2p.....	38
Fig. 33 Probabilidad en el modelo orbital 3p.....	38
Fig. 34 Probabilidad en el modelo orbital 4p.....	38
Fig. 35 Probabilidad en el modelo orbital 5p.....	38
Fig. 36 Probabilidad en el modelo orbital 6p.....	39
Fig. 37 Probabilidad en el modelo orbital 7p.....	39
Fig. 38 Probabilidad en el modelo orbital 3d.....	39
Fig. 39 Probabilidad en el modelo orbital 4d.....	39
Fig. 40 Probabilidad en el modelo orbital 5d.....	40
Fig. 41 Probabilidad en el modelo orbital 6d.....	40

Fig. 42 Probabilidad en el modelo orbital 4f .....	40
Fig. 43 Probabilidad en el modelo orbital 5f .....	40
Fig. 44 Orden de energía de los orbitales .....	42
Fig. 45 Elementos con Variación de energía .....	43
Fig. 46 Diseño escena Cargar Atomos.....	45
Fig. 47 Icono Ubicar .....	45
Fig. 48 Plano sobre superficie.....	46
Fig. 49 Icono Escala.....	46
Fig. 50 Escala atómica .....	46
Fig. 51 Menú Orbitales - Elemento.....	47
Fig. 52 Notación de Spin .....	47
Fig. 53 Miniatura Tabla Periódica .....	48
Fig. 54 Inicio de App .....	49
Fig. 55 Detectando superficie .....	50
Fig. 56 Escala átomo de Titanio .....	51
Fig. 57 Subnivel 3p.....	52
Fig. 58 orbitales $l=0$ .....	52
Fig. 59 Átomo de Rutenio.....	52
Fig. 60 Menú Tabla Periódica.....	53
Fig. 61 Orbital 4d $m=0$ respuesta radial.....	54

Fig. 62 Orbital 4d  $m=-2$  ..... 54

Fig. 63 Orbital 4s ..... 54

# 1 Planteamiento

## 1.1 Problema

Por costumbre se suele usar al representar un átomo de cualquier modelo bajo la representación que le otorgó Bohr en 1903, pero este ha sido redirigido al modelo de orbitales desde la década de los setenta, la comodidad de manejar el modelo de Bohr se debe a su sencillez, tanto en la estructura, conceptos físicos y matemáticos, como por esquema en dos dimensiones.

El modelo de Bohr establece que los electrones de un átomo giran alrededor del núcleo como los planetas en el sistema solar siguiendo una órbita circular de determinado radio, Este modelo presenta problemas físicos, en cuanto a la energía que emite el electrón, interacciones entre ellos, la forma en que se mantiene su estructura, y no explica el comportamiento de onda-partícula que demostraron otros físicos.

Este modelo y otros como los de Rutherford, aunque ayudan en la comprensión “teórica” de conceptos de valencia y enlaces, no corresponde a un modelo actual como lo es “el modelo orbital” o “cuántico-ondulatorio”, en este representan muchos conceptos físicos, matemáticos, químicos, que en otros modelos no aplicaban, añadiendo los orbitales de ellos se tienen las ecuaciones de onda donde podemos encontrar las probabilidades de hallar cada electrón de un átomo, teniendo así teóricamente la estructura de los átomos, pero pese a tener una representación tridimensional, los libros solo presentan secciones transversales, figuras separadas, aclarando conceptos mostrando pocos orbitales por su complejidad y esto puede ser desarrollado en ambientes virtuales, que facilitan la visualización de los átomos, permitiendo ver en conjunto todo lo que representa el modelo cuántico para cada átomo.

En este proyecto se diseña e implementa una interfaz en realidad aumentada con el software “Unity” sobre los elementos químicos, para observar en ellos las estructuras atómicas, que representan las probabilidades de encontrar cada electrón de este modelo orbital. Ya que en este proyecto pretende mostrar el modelo atómico actual este trabajo se limita a las teorías actuales en los campos de química y física, teniendo así ya determinados formas, tamaños, medidas, como su comportamiento teórico, por lo cual el desarrollo de los modelos digitales, se limita a las teorías que se rigen actualmente.

## 1.2 Justificación

“Con el fracaso del modelo de Bohr se descubrió que las propiedades de un electrón en un átomo tenían que describirse en términos de onda-mecánica” (p. 6). (C & A K, 1975). Debido a la demora en la investigación del modelo tradicional “modelo de Bohr”, los avances en la investigación del nuevo “Modelo orbital”, en donde la física mecánica tiene un papel importante para poder actualizar el concepto y el diseño que tiene el modelo, son pocas las investigaciones en donde se trabaja en conjunto con la tecnología (realidad aumentada). El concepto del modelo antiguo (modelo de Bohr) no está mal, ya que incluso en la actualidad sirve como base para mostrar los conceptos de estructuras atómicas de los elementos químicos, pero se sabe que el modelo de Bohr no representa realmente el átomo y teniendo como modelo al que se le considera actualmente como el que lo describe con mayor eficacia el modelo orbital o cuántico ondulatorio, podemos tener una mayor aproximación de cómo se ven los átomos de los elementos químicos.

La estructura de los elementos químicos de la tabla periódica, se basan en ecuaciones, leyes y reglas, lo cual representa una dificultad para aglomerar todo en un modelo digital. Lo que se quiere lograr con este planteamiento de esta problemática es implementar una aplicación de realidad aumentada en “Unity” para la elaboración de los modelos orbitales de los elementos químicos y desarrollar una estrategia basada en realidad aumentada para un dispositivo móvil, aportando una herramienta para diversos campos disciplinares.

## 1.3 Objetivos

### 1.3.1 General

- Desarrollar una aplicación basada en realidad aumentada para la visualización de los modelos orbitales de los elementos químicos.

### 1.3.2 Específicos

- Simular los orbitales del modelo cuántico ondulatorio de los elementos químicos.
- Programar una estrategia basada en realidad aumentada para interactuar y visualizar con la simulación de los modelos químicos de la tabla periódica.

## 1.4 Antecedentes

- Aplicación de realidad aumentada para la elaboración de experimentos de química como herramienta de apoyo en la enseñanza de los tipos de reacciones según la organización de los átomos, para noveno grado de bachillerato, Jimmy Alexander Muñoz Gutiérrez, David Stiven Valdés Julio, universidad de Cundinamarca extensión Chía.

- Aplicativo de realidad aumentada diseñado para dar apoyo a los profesores en la enseñanza de temáticas tales como los tipos de reacciones químicas según la organización de los átomos; siendo una herramienta de ayuda en los procesos de elaboración de laboratorios virtuales en ambientes seguros y estables para los estudiantes.



*Fig. 1 Realidad aumentada para elementos de laboratorio  
Fuente: (Valdes Julio & Muñoz Gutiérrez, 2020)*

- Ambiente virtual de aprendizaje basado en tecnologías de realidad aumentada como estrategia didáctica para el aprendizaje de la configuración de algunas moléculas del estudio de la química, Jhonattan Guillermo Rodríguez Rojas, Mallerly Katherine Valencia Cristancho

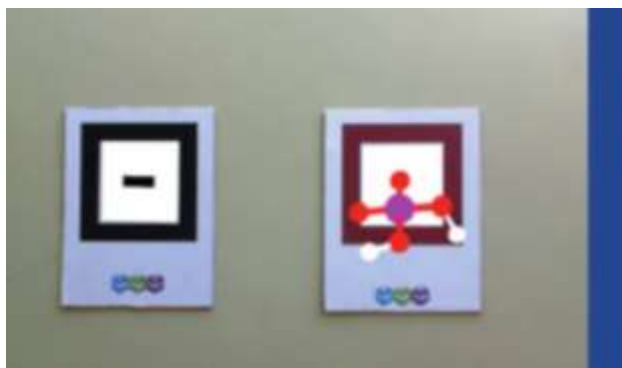
- La investigación hace referencia a la importancia que tiene la implementación de las TIC en un escenario educativo, en este caso, el uso de un Ambiente Virtual de Aprendizaje (AVA) con tecnologías de Realidad Aumentada (Augmented Reality, AR), como estrategia didáctica para la enseñanza y aprendizaje de las generalidades de algunas moléculas de la química orgánica e inorgánica que no son perceptibles a simple vista.



*Fig. 2 Enlaces de átomos*  
*Fuente: (Rodríguez Rojas & Valencia Cristancho, 2014)*

- Realidad aumentada para el diseño de secuencias de enseñanza-aprendizaje en química.  
Cristian Merino, Sonia Pino, Eduardo Meyer, José Miguel Garrido y Felipe Gallardo.

- Propone la manipulación, interacción e integración de formatos de información tridimensional que permite una mejor conexión entre los aspectos teóricos y la experiencia práctica que guía un proceso de transformación de fenómenos científicos. En este artículo presentamos una actividad prototipo diseñada para la enseñanza de la química.

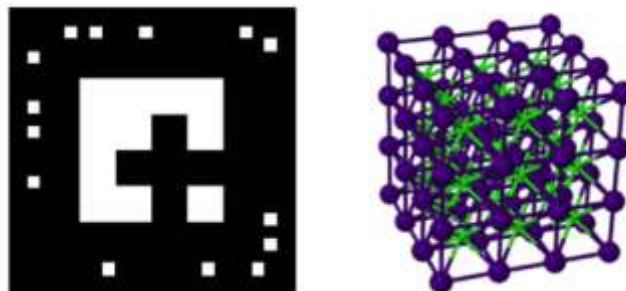


*Fig. 3 Modelo molecular tomando átomos como esferas*  
*(Merino, Pino, Meyer, Garrido, & Gallardo, 2014)*

- Aumentando la realidad química, Luisa Roqueta Buj

- El uso de nuevas tecnologías como la Realidad Aumentada en la enseñanza de la Química permite manejar información virtual y asociarla a elementos de la vida real. Se accede a la misma a través de un dispositivo tecnológico con un software específico.





*Fig. 4 Marcador y estructura molecular*  
*Fuente: (Roqueta , 2017)*

- Implementation of Chemical Reaction Based on Augmented Reality, Setiawan, Alexander y Rostianingsih, Silvia.

- One lesson that can make use of this technology is chemistry, specifically about chemical reactions. On this research, a chemical reactions learning application that utilizes library Vuforia and Unity by using C# programming language will be made. Along with the 3D object creation is made by an application called Blender.



*Fig. 5 Modelo atómico por esferas.*  
*Fuente: (Setiawan, Rostianingsih, & Widodo, 2017)*

- AR Chemistry Augmented Reality Education Arloon. VirQ Tech.



*Fig. 6 Modelo molecular por esferas*  
*Fuente: (Tech, 2017)*

- Dáskalos – an interactive science teacher for augmented reality. Prefrontal cortex  
Dáskalos es una aplicación de Realidad Aumentada, especialmente las gafas inteligentes Epson Moverio BT-200. La aplicación estará disponible en la App Store de Moverio en breve.



*Fig. 7 Moléculas RA*  
*Fuente: (prefontal, 2015)*

Se puede destacar de los antecedentes el uso de herramientas de desarrollo de realidad aumentada, como Vuforia, Metaic, las cuales por una breve revisión cuentan con paquetes de código que facilitan el uso de los ambientes digitales, pero pese a esto, generan un letrero como marca de agua en la pantalla del dispositivo, que ocupa espacio y no se vincula con los demás elementos de la interfaz gráfica, por lo cual, se opta por el uso de la herramienta “AR Foundation”, la cual contiene elementos básicos para el desarrollo de estos ambientes virtuales, lo que implica, mayores posibilidades de desarrollo, con mayor relación con el código de Unity. Esta herramienta se liga con el uso de ArCore, en los dispositivos. Las estrategias, usadas en estos proyectos, se involucraron en el desarrollo de la estrategia para este proyecto, así como las interfaces, y escenarios.

## 2 Marco teórico

### 2.1 Realidad aumentada

Este proyecto tiene como fundamento usar la tecnología grafica de realidad aumentada, para visualizar el modelo atómico, así que para esto se debe entender a qué se refiere esta tecnología. La realidad aumentada, se refiere a la inclusión, en tiempo real, de elementos virtuales dentro de un entorno físico, lo cual se logra usando dispositivos, como lentes, dispositivos móviles u otros dispositivos. Este entorno virtual, se diferencia de otros, ya que solo se agrega un conjunto de elementos digitales a la realidad, teniendo en su mayoría, el mundo físico, a comparación de tecnologías como la realidad virtual, donde todo el entorno es puramente una simulación digital.

Tipos de realidad aumentada según su mecánica para interactuar:

Marcadores:

Los marcadores son símbolos impresos en papel o imágenes sobre las cuáles se superponen los elementos virtuales. Este contenido adicional aparece cuando la app de Realidad Aumentada asociada reconoce el marcador y activa la experiencia.

Objetos tangibles:

La Realidad Aumentada a partir de formas físicas es la modalidad más atípica de los cuatro tipos de Realidad Aumentada. Este tipo de tecnología no es sensible al entorno, sino que utiliza objetos concretos para activar y mostrar la información.

Realidad Aumentada sin marcadores.

Hablamos de las funciones como ‘Smart Terrain’, incluida en la plataforma de software Vuforia. Se trata de un motor que convierte a los objetos cotidianos –una taza, un libro o el mando de la tele– en el escenario perfecto de una experiencia de Realidad Aumentada o videojuego.

Geolocalización:

Por localización, modalidad en la que el dispositivo combina la información ofrecida por el GPS y los datos descargados desde Internet con un sinnúmero de combinaciones y dinámicas.

## 2.2 Modelo atómico

El modelo cuántico reúne un conjunto de disciplinas, como la física, química, matemática, así como áreas de estudio como la informática cuántica, que involucra áreas como la electrónica. Para el desarrollo de este proyecto se dará una revisión a la evolución de los modelos atómicos, las estructuras atómicas y a conceptos necesarios para comprender el modelo cuántico.

Los modelos atómicos son representaciones de la estructura y funcionamiento de un átomo, según la idea que, en cada época de la humanidad se tenía sobre la materia. Estos modelos basados desde planteamientos filosóficos de la antigüedad, conllevan, al concepto de átomo como partícula fundamental de la materia, modelo de Dalton (1803), posteriormente añadir la partícula del electrón a la estructura del átomo, modelo de Lewis (1902) y Thomson (1904), así como la determinación de un núcleo, modelo de Rutherford (1911), la clasificación de orbitas dados los niveles de energía que emiten los electrones, creando partículas al saltar entre niveles los fotones, modelo de Bohr (1913), las formas de estas orbitas así como la existencia de subniveles, modelo de Sommerfeld (1916), hasta concebir a los electrones como ondulaciones, permitiendo una interpretación probabilística de la función de onda, modelo de Schrödinger (1926), conocido como modelo Cuántico-Ondulatorio.

Dados estos modelos podemos clasificar la estructura atómica, empezando por el núcleo donde se centra la mayor parte de su masa, aunque diminuto en proporción comparado con el tamaño del átomo. La clasificación de niveles de energía, los cuales indican niveles estables de energía basados en el número de electrones, los cuales a su vez tendrían subniveles, teniendo pequeñas variaciones de energía entre electrones de un mismo nivel, terminando en dividir estos subniveles en orbitales, representando distintas figuras para pares de electrones con un mismo nivel de energía, subniveles que son ordenados por su nivel de energía, como se muestra en el Diagrama de Moeller Fig. 8.

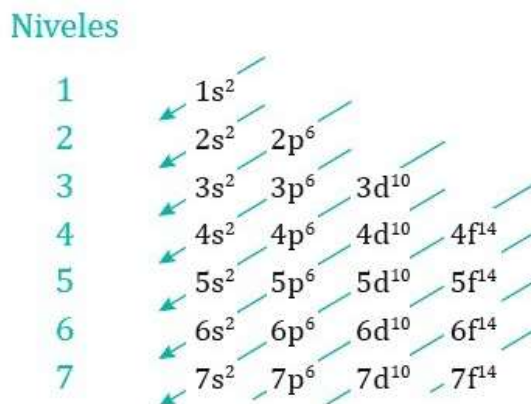


Fig. 8 Diagrama de Moeller  
Fuente: (PuraQuímica Weebly)

## 2.3 Modelo Cuántico-Ondulatorio

Este modelo se caracteriza por los orbitales que, en rigor, no representan “lugares” o “zonas” por donde los electrones circulan, sino que son funciones matemáticas que definen la energía del electrón. En general, se puede conocer la energía del electrón, pero no su ubicación (es el Principio de Incertidumbre formulado por Heisenberg). Así, hay una determinada probabilidad de encontrar al electrón en algún lugar del átomo. Lo que graficamos como “orbital” es la región en la cual podríamos encontrar al electrón, con una probabilidad dada. La aproximación orbital es una manera imperfecta pero útil de describir la estructura atómica y de entender, predecir y calcular resultados experimentales. Hay maneras más precisas, pero normalmente más difíciles de interpretar. Pero siempre hay que estar atento a la posibilidad de que existan diferencias significativas entre el sistema real y el modelo matemático para este sistema.

### 2.3.1 Orbitales atómicos

Los orbitales se designan en función de los valores característicos de  $n$ ,  $l$  y  $m_l$  y es posible referirse a ellos mediante la notación:  $nl^x_{m_l}$ .  $x$ : indica el número de electrones.

La función de onda de Schrödinger para una combinación dada de valores de  $n$ ,  $l$  y  $m_l$  se llama orbital

### 2.3.2 Números cuánticos

**$n$ :** Número cuántico principal (numérica):

Es el número cuántico que nos dice en qué nivel de energía está el electrón en el átomo.

$n = 1 = \text{nivel } k$        $n = 2 = \text{nivel } l$        $n = 3 = \text{nivel } m$        $n = 4 = \text{nivel } n$

$n = 5 = \text{nivel } o$        $n = 6 = \text{nivel } p$        $n = 7 = \text{nivel } q$

***l***: Número cuántico azimutal (alfabética: *s, p, d, f, ...*):

Es el número cuántico que determina el subnivel, así como los electrones que puede contener.

Para  $l = 0$ , orbitales *s*      Para  $l = 1$ , orbitales *p*      Para  $l = 2$ , orbitales *d*

Para  $l = 3$ , orbitales *f*

***m***: Son los números que nos dicen cómo gira (qué energía tiene debida a la rotación) del electrón en el átomo.

Para  $l = 0$ ,  $m = 0$       Para  $l = 1$ ,  $m = -1, 0, 1$       Para  $l = 2$ ,  $m = -2, -1, 0, 1, 2$

Para  $l = 3$ ,  $m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$

***S***: Es el número que nos dice qué orientación tiene el espín del electrón.

$s: (+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ .

## 2.4 Átomos hidrogenoides

Átomos con un núcleo y un electrón, como el caso del hidrógeno o de otros átomos ionizados hasta quedar con un electrón  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ ,  $\text{Be}^{3+}$  y  $\text{B}^{4+}$ .

La distribución electrónica se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger para el átomo, y ésta solo tiene solución exacta para átomos hidrogenoides.

## 2.5 Átomos polieletrónicos

Posee dos o más electrones. La ecuación de Schrödinger para átomos polieletrónicos no tiene solución analítica debido a los términos de repulsión entre electrones, que aparecen

en el operador energía potencial. Sin embargo, siempre es posible obtener soluciones numéricas de enorme precisión utilizando métodos matemáticos aproximados.

Para utilizar las funciones de onda hidrogenoides en los átomos polielectrónicos, y dentro de la aproximación orbital, sólo se debe reemplazar  $Z$  por  $Z_{efectiva}$ , cambiando la carga del modelo general por la carga positiva neta experimentada por un electrón en un átomo polielectrónico. El número atómico  $Z$  sólo aparece en la parte radial de las funciones de onda hidrogenoides, en consecuencia, sólo éstas se modifican en la aproximación orbital. Las partes angulares no se modifican debido a la hipótesis de considerar las repulsiones inter electrónicas de simetría esférica.

### 3 Marco metodológico

Esta investigación se trata de un desarrollo de software, este marco de trabajo es usado para estructurar, planificar y controlar el proceso de desarrollo en sistemas de información. Las etapas de este se pasan por una serie de fases, de investigación, parametrización y creación. Esto permite el manejo del tiempo, así como la creación, revisión y reparación o ajustes de las versiones del software antes de su versión final.

La estructuración del desarrollo se plantea desde los antecedentes, en donde se puede observar trabajos similares, aportando ideas para este mismo, la investigación de los conceptos necesarios para abarcar los orbitales atómicos y de esta manera se determinan los objetivos.

Se plantea el tiempo para las fases teniendo un estimado de seis meses para el proyecto, empezando con un periodo de tiempo de investigación de dos meses, para reunir datos y empezar con las simulaciones, tres meses para el diseño y creación de los modelos, un mes para emplear los modelos en un ambiente de realidad aumentada, estos periodos se interceptan entre ellos teniendo en cuenta el proceso de control.

El proceso de investigación, diseño, programación, revisión y creación de modelos permite la creación del software, en un proceso de reiteraciones, entre el diseño y revisión, generando diferentes versiones en el proceso. Los modelos de cada orbital se plantean desde las ecuaciones, de Schrödinger, se diseña un modelo que se base en dichas funciones, se comprueban resultados y son diseñados nuevamente en un proceso cíclico, llegando a la versión final que cumpla con los objetivos de este proyecto.

Fase de investigación. Este proyecto tiene un grado de complejidad en tanto en parte de las ecuaciones de onda, como de diseño e investigación, entender las ecuaciones de los niveles de los orbitales es necesario para poder crear los modelos con la mayor precisión, para su programación en tanto al proceso se realizó en cuatro una parte investigativa o teórica, partiendo de los antecedentes y las ecuaciones para plantear posibles diseños, determinando la interfaz para el ambiente de realidad aumentada.



Fase de simulación, segunda fase de simulaciones previas donde se utilizó la plataforma de GeoGebra para la elaboración de gráficas de probabilidad radial, la plataforma Matlab en programación de las funciones angulares de orbitales, desde sus respectivas ecuaciones de onda.

Fase diseño, para actualizar el modelo de Bohr y darle una perspectiva más real del modelo orbital cuántico, con una interfaz sencilla, se encuentra la tercera fase el diseño de la interfaz en Unity de los niveles de cada elemento químico de la tabla periódica. es necesario un conocimiento previo acerca de estructuras atómicas, para implementar las propiedades del modelo, una vez que se haya logrado ejecutar cada elemento químico en realidad aumentada, se procede a corrección de errores.

Fase de revisión y corrección, cuarta parte para ajustar los orbitales, así como la interfaz gráfica, lo que implica verificación de datos expresados, corrección de escalas, correcta visualización de los elementos de cada modelo y el manejo de la interfaz de usuario para manejar los modelos.

## 4 Desarrollo

### 4.1 Investigación

Para el desarrollo de esta aplicación se diseñan los orbitales, desde las funciones de onda solución a las ecuaciones de Schrödinger, para lo cual se estudió las ecuaciones angulares y radiales, estas son expresadas de diferentes formas en distintos documentos y es necesario para comprender los orbitales, tener claro cada una de ellas y lo que representa en un modelo físico.

Es importante resaltar la teoría de cuerdas, modelo de física teórica, que asume las partículas subatómicas como estados vibracionales de un objeto básico llamado cuerda o filamento, dejando de ver estas partículas como elementos puntuales, es decir la representación de electrones como esferas de carga que orbitan un núcleo atómico. En cambio, postula al electrón como una cuerda minúscula en forma de lazo vibrando en un espacio-tiempo de más de cuatro dimensiones, planteamiento matemático que solo funciona con la teoría de que el universo tiene al menos once dimensiones. Según esta teoría no es posible conocer la posición y velocidad de partículas, tan solo determinar la distribución de probabilidad, indicada por la ecuación diferencial de Schrödinger.

#### 4.1.1 Ecuación de ondas de Schrödinger

Desarrollada en 1925 por el físico austriaco Erwin Schrödinger, describe temporalmente el movimiento subatómico de partículas masivas de naturaleza ondulatoria y no relativista. Nos permite derivar el estado cuántico de un sistema, como un átomo y su evolución temporal. La cuantización de estados está implícita dentro de la propia ecuación, por ejemplo, los orbitales dentro de un átomo, que aparecen de forma natural como estados estables solución de esta ecuación.

$$E\Psi = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m_e} \left( \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} \right) - Z\frac{e^2}{r}\Psi$$

*Ecuación de ondas*

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial\Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2\Psi}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial\Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{8\pi^2\mu}{\hbar^2} (E_T - V)\Psi = 0$$

*Ecuación en coordenadas esféricas*

#### 4.1.1.1 Función de onda

La función de onda nos permite interpretar los orbitales como solución estable, que se describe a la ecuación de Schrödinger. Descrita por la letra griega  $\Psi_{n,l,m}$  “Psi”, describe las propiedades ondulatorias de la partícula (electrón), en función de las coordenadas esféricas, radio ( $r$ ), un ángulo entre los ejes x-y ( $\theta$ ) y un ángulo para el eje z ( $\phi$ ).

Para el desarrollo posterior se describen las coordenadas, determinando el uso de estas en este proyecto.

Coordenadas cartesianas a esféricas:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\theta = \tan^{-1} \frac{y}{x}$$

$$\phi = \tan^{-1} \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}$$

Coordenadas esféricas a cartesianas:

$$x = r \cos \theta \sin \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \phi$$

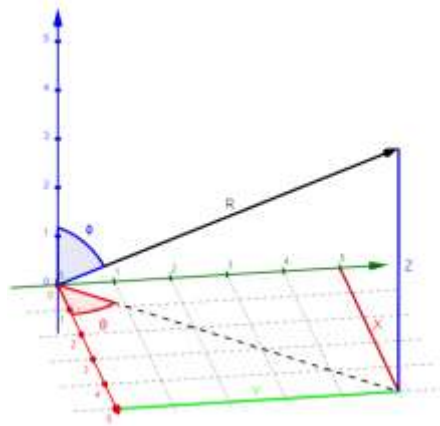


Fig. 9 Coordenadas esféricas y cartesianas  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra

$$\underbrace{\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi)}_{\text{Función de onda}} = \underbrace{R_{n,l}(r)}_{\text{Radial}} \cdot \underbrace{\Theta_{l,m_l}(\theta) \cdot \Phi_{m_l}(\phi)}_{\text{Angular}}$$

La función de onda se puede tratar desde la probabilidad vista por el radio desde el núcleo atómico, así como por un área de probabilidad vista desde la dirección angular, estas se pueden tratar por separado determinando los orbitales como solución a estas ecuaciones, teniendo a la solución

radial, en función a la distancia al núcleo y la solución angular en función a la dirección en que se determine la densidad de probabilidad.

### Solución Parte radial

A continuación, se tratará la parte radial de la función de onda (R) en específico de la variación de la ecuación de ondas en función a la distancia al núcleo, en función a los números cuánticos (n,l) para cada par de electrones es decir para cada orbital.

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3 n^4}} \cdot \left(\frac{2r}{n}\right)^l \cdot e^{-\frac{r}{n}} \cdot L_{n+l}^{2l+1}(\sigma)$$

$$L_p^q(\sigma) = -\frac{\partial^q \left[ e^{\sigma} \frac{\partial^p (\sigma^p e^{-\sigma})}{\partial \sigma^p} \right]}{\partial \sigma^q} \quad \sigma = \frac{2Zr}{na_0}$$

*Polinomios asociados de Laguerre*

La solución de la parte radial nos permite ver la distribución de probabilidad en cada orbital, es decir con respecto a la distancia al núcleo se presentan distintas densidades de porcentaje de probabilidad de encontrar el electrón, teniendo zonas de nula densidad de cero probabilidades de encontrar al electrón, estos nodos donde la función de onda cambia de signo.

Para obtener las funciones solución a la ecuación de ondas, se puede reemplazar por los números cuánticos de cada orbital en este caso dependen solamente de dos números cuánticos,  $n$  y  $l$ , que se refieren al nivel y subnivel, del átomo. A continuación, una tabla con cada una de las funciones de cada subnivel requerido para abarcar los ciento dieciocho elementos de la tabla periódica actual.

Tabla 1. Funciones radiales

$l$	$n$	$R_{n,l}(\rho) / \left(\frac{z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}; \rho = \frac{zr}{a_0}$
0	1	$S_1 = 2e^{-\rho}$
	2	$S_2 = \frac{1}{2\sqrt{2}}(2 - \rho)e^{-\frac{\rho}{2}}$
	3	$S_3 = \frac{2}{81\sqrt{3}}(27 - 18\rho - 2\rho^2)e^{-\frac{\rho}{3}}$
	4	$S_4 = \frac{1}{768}(-\rho^3 + 24\rho^2 - 144\rho + 192)e^{-\frac{\rho}{4}}$
	5	$S_5 = \frac{2}{46875\sqrt{5}}(2\rho^4 - 100\rho^3 + 1500\rho^2 - 7500\rho + 9375)e^{-\frac{\rho}{5}}$
	6	$S_6 = \frac{-1}{524880\sqrt{6}}(\rho^5 - 90\rho^4 + 2700\rho^3 - 32400\rho^2 + 145800\rho - 174960)e^{-\frac{\rho}{6}}$
	7	$S_7 = \frac{2(4\rho^6 - 588\rho^5 + 30870\rho^4 - 720300\rho^3 + 7563150\rho^2 - 31765230\rho + 37059435)}{259416045\sqrt{7}}e^{-\frac{\rho}{7}}$
1	2	$P_2 = \frac{\rho}{2\sqrt{6}}e^{-\frac{\rho}{2}}$
	3	$P_3 = \frac{-2\rho}{81}\sqrt{\frac{2}{3}}(\rho - 6)e^{-\frac{\rho}{3}}$
	4	$P_4 = \frac{\rho}{256\sqrt{15}}(\rho^2 - 20\rho + 80)e^{-\frac{\rho}{4}}$
	5	$P_5 = \frac{-2\rho}{46875}\sqrt{\frac{2}{15}}(2\rho^3 - 90\rho^2 + 1125\rho - 3750)e^{-\frac{\rho}{5}}$
	6	$P_6 = \frac{\rho}{104976\sqrt{210}}(\rho^4 - 84\rho^3 + 2268\rho^2 - 22680\rho + 68040)e^{-\frac{\rho}{6}}$
	7	$P_7 = \frac{-4\rho}{86472015\sqrt{21}}(\rho^5 - 140\rho^4 + 6860\rho^3 - 144060\rho^2 + 1250525\rho - 3529470)e^{-\frac{\rho}{7}}$
	2	3
4		$D_4 = \frac{-\rho^2}{768\sqrt{5}}(\rho - 12)e^{-\frac{\rho}{4}}$
5		$D_5 = \frac{2\rho^2}{46875}\sqrt{\frac{2}{35}}(2\rho^2 - 70\rho + 525)e^{-\frac{\rho}{5}}$
6		$D_6 = \frac{-\rho^2}{209952\sqrt{105}}(\rho^3 - 72\rho^2 + 1512\rho - 9072)e^{-\frac{\rho}{6}}$
3	4	$F_4 = \frac{\rho^3}{768\sqrt{35}}e^{-\frac{\rho}{4}}$
	5	$F_5 = \frac{-2\rho^3}{46875}\sqrt{\frac{2}{35}}(\rho - 20)e^{-\frac{\rho}{5}}$

## Solución parte Angular

En el orbital representa la figura tridimensional en la que tenemos un alto grado de probabilidad de hallar uno o dos electrones, esta figura tiene simetría esférica, es decir que se rigen con respecto a un centro, estos sistemas son tomados como base para resolver múltiples problemas físicos.

$$Y_{l,m_l}(\theta, \phi) = \Theta_{l,m_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi)$$

$$\Phi_{m_l}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm im_l \phi} \quad \Theta_{l,m_l}(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m_l|!)}{2(l+|m_l|)!}} P_l^{|m_l|}(\cos \theta)$$

$$P_l^m(\cos \theta) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (\sin \theta)^m \frac{d^m(P_l(\cos \theta))}{d(\cos \theta)^m}$$

*Polinomios asociados de Legendre*

Esta solución, como ya se mencionó da forma a los orbitales indica un límite en el cual, la probabilidad externa es despreciable, creando así el contorno de cada orbital, los cuales se resuelven en relación, con los números cuánticos l y m, con relación a los subniveles y los orbitales de cada subnivel. La solución a los orbitales necesarios para construir los átomos se presentan a continuación.

*Tabla 2. Funciones angulares*

$Y_{m,l}$		$l$			
		0	1	2	3
$m$	-3				$f_{x(x^2-3y^2)} = \sin^3 \theta \cos 3\phi$
	-2			$d_{xy} = \sin^2 \theta \cos 2\phi$	$f_{xyz} = 5 \cos \theta \sin^2 \theta \cos 2\phi$
	-1		$p_x = \sin \theta \cos \phi$	$d_{xz} = 2 \cos \theta \sin \theta \cos \phi$	$f_{xz^2} = (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \cos \phi$
	0	$s = 1$	$p_z = \cos \theta$	$d_{z^2} = 3 \cos^2 \theta - 1$	$f_{z^3} = 5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta$
	1		$p_y = \sin \theta \sin \phi$	$d_{yz} = 2 \cos \theta \sin \theta \sin \phi$	$f_{yz^2} = (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \sin \phi$
	2			$d_{x^2-y^2} = \sin^2 \theta \sin 2\phi$	$f_{z(x^2-y^2)} = 5 \cos \theta \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi$
	3				$f_{y(3x^2-y^2)} = \sin^3 \theta \sin 3\phi$

La función angular se repite en cada nivel con el mismo tipo de orbital, se diferencian en su distribución, que obtenemos de la solución radial, estas serán necesarias para el desarrollo de la aplicación en el desarrollo de los modelos.

$$\text{Densidad de probabilidad } |\Psi_{n,l,m}|^2$$

Función de distribución radial: Es la probabilidad total de encontrar el electrón en un elemento diferencial de capa esférica, es decir, a una distancia del núcleo, dentro de un diferencial de volumen esférico

## 4.2 Diseño

Es esta etapa se crean los modelos basándose en las funciones radiales y angulares, para lo cual primero se desarrolla la forma del orbital que se basa en la respuesta angular de la función de onda respectiva, para ello se contempla la construcción desde código de estos modelos usando el hardware gráfico en Unity, el cual maneja formación de superficies planas generalmente triángulos los cuales en conjunto pueden formar cualquier figura o modelo 3D.

Usando triángulos para formar las figuras con las coordenadas de las funciones angulares se crean los modelos de los orbitales, como se muestra en el siguiente esquema:

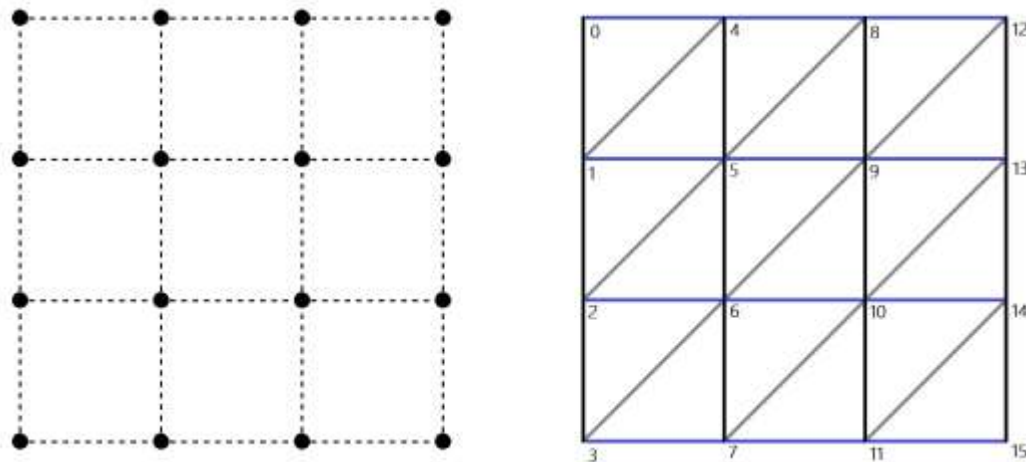


Fig. 10 Esquema malla de coordenadas  
Fuente: Propia

Teniendo las funciones ya preparadas se procede a simular en Matlab, con las coordenadas limitadas por el número de ángulos, se crean una cuadrícula de puntos, los cuales se incluyen en un solo vector de coordenadas, posteriormente preparar un vector de triángulos que

formaran las capas visibles de los modelos, estos triángulos son visibles en un solo sentido, por lo cual es necesario organizar en el sentido horario por el número de coordenadas del vector de datos.

Como se puede ver en la Fig. 10 se enumeraron 16 coordenadas, lo que necesitara de triángulos como, 0,4,1; 1,4,5; 10,14,11... con esta misma estrategia se programó cada modelo orbital en Matlab de tal forma que se pueda cambiar la cantidad de ángulos que representaría el número de coordenadas, cambiando así la definición de los modelos.

### 4.3 Matlab

Se uso la plataforma Matlab para graficar los modelos de cada orbital teniendo en cuenta que para usar las funciones matemáticas que describen las formas se usara un solo vector de datos de coordenadas y un vector para formar planos triangulares usando las coordenadas; esto diseñado desde una plataforma como Matlab facilita la corrección de errores matemáticos en el diseño de los modelos.

Para crear cada orbital se crea un algoritmo de secuencia de coordenadas para formar los distintos orbitales como figuras.

```
theta = 0:360/d:360;  
phi= 0:180/d:180;
```

Las variables para la función angular de cada orbital son  $\theta$ ,  $\phi$ , lo que se propone para generar cualquier figura es que theta tenga un rango de 0 a 360, en pasos de una variable d, que permita cambiar la cantidad de puntos o coordenadas y por ende la definición del modelo resultado; de esta forma la variable phi con un recorrido de 0 a 180 por cada iteración de theta puede cubrir una esfera y por ende cualquier figura de simetría esférica.

```
x = r*cosd(theta(n))*sind(phi(m));  
y = r*sind(theta(n))*sind(phi(m));  
z = r*cosd(phi(m));  
px = [px x];  
py = [py y];  
pz = [pz z];
```

El resultado de la función angular es un radio 'r', al cual se transforma a coordenadas cartesianas y por cada variación de  $\theta$ ,  $\phi$ , se guarda una coordenada, por ende, solo es necesario



cambiar la función 'r' dependiendo de cada combinación de números cuánticos del orbital como se muestra en Tabla 2. Funciones angulares, obteniendo la probabilidad como  $Y_{m,l}(\theta, \phi)^2$ .

Para los orbitales s es decir  $l = 0$ :

```
r = 1;
```

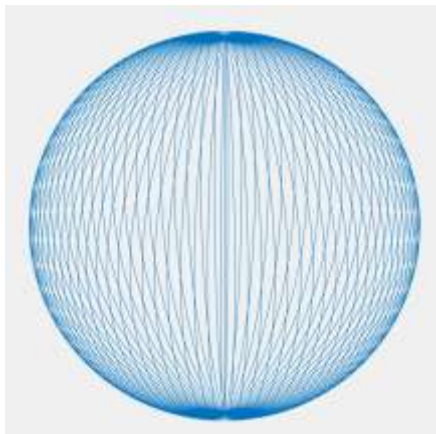


Fig. 11 Orbital  $l=0, m=0$   
Fuente: Propia elaborado en Matlab

Para los orbitales p es decir  $l = 1$ :

```
r = (sind(phi(m))*cosd(theta(n)))^2;  
r = (cosd(phi(m)))^2;  
r = (sind(phi(m))*sind(theta(n)))^2;
```

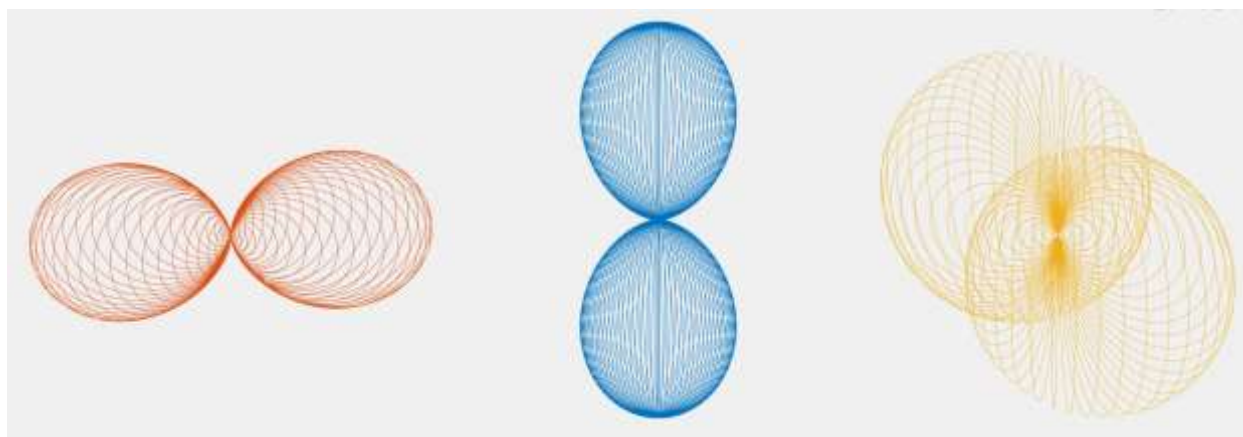


Fig. 12 Orbitales  $l=1, m=-1,0,1$   
Fuente: Propia elaborado en Matlab

Para los orbitales  $d$  es decir  $l = 2$ :

```
r = (sind(phi(m))*cosd(phi(m))*cosd(theta(n)))^2;
r = (sind(phi(m))*sind(phi(m))*sind(2*theta(n)))^2;
r = (3*cosd(phi(m))^2-1)^2;
r = (sind(phi(m))*sind(phi(m))*cosd(2*theta(n)))^2;
r = (sind(phi(m))*cosd(phi(m))*sind(theta(n)))^2;
```

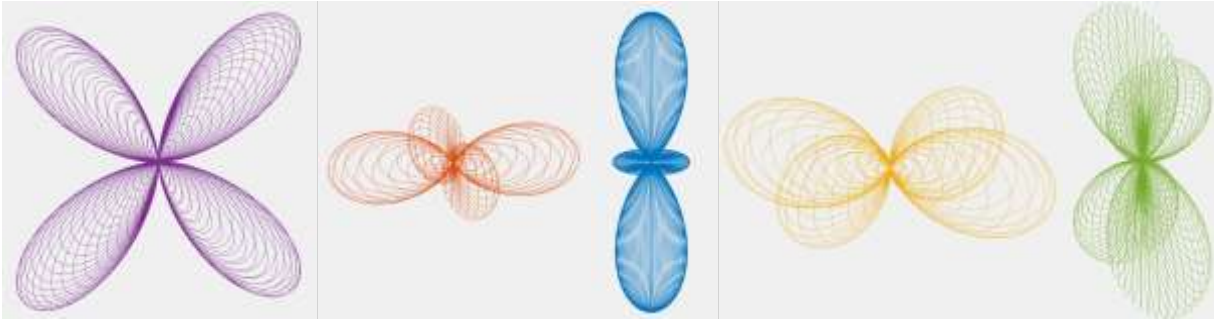
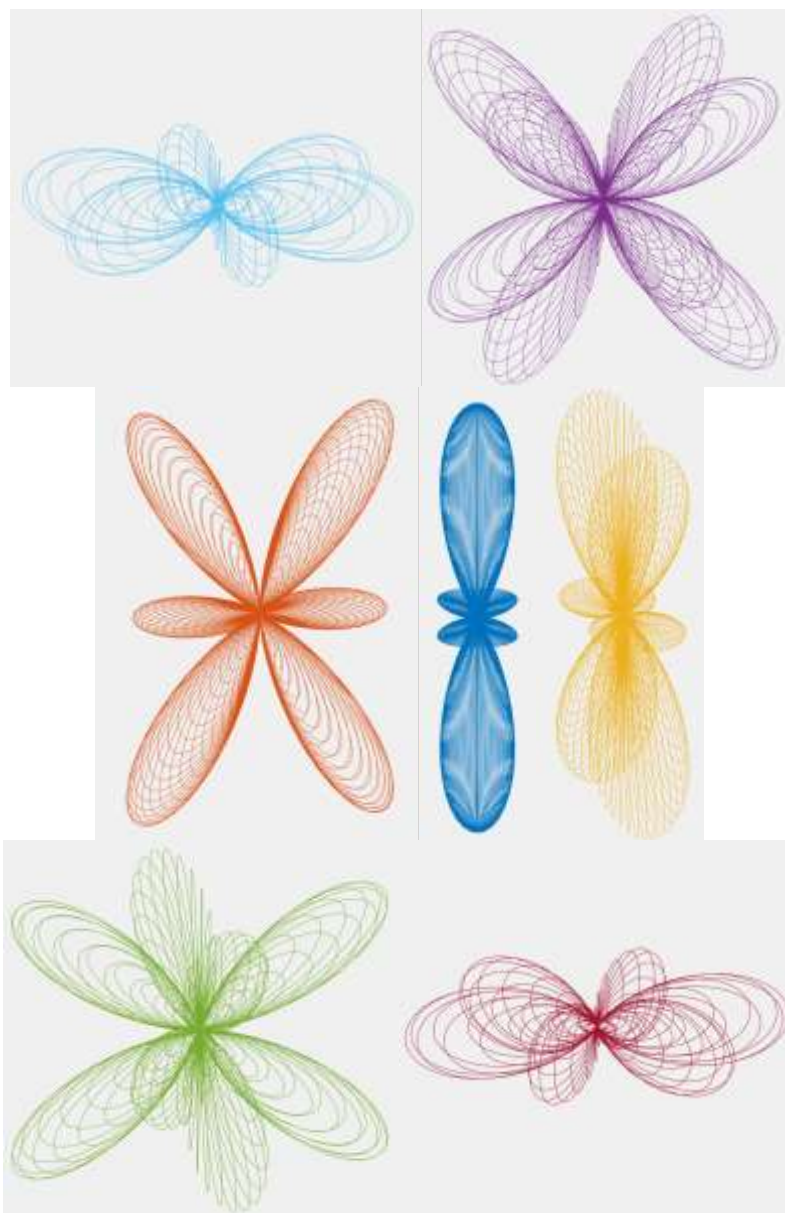


Fig. 13 Orbitales  $l=2$ ,  $m=-2,-1,0,1,2$   
Fuente: Propia elaborado en Matlab

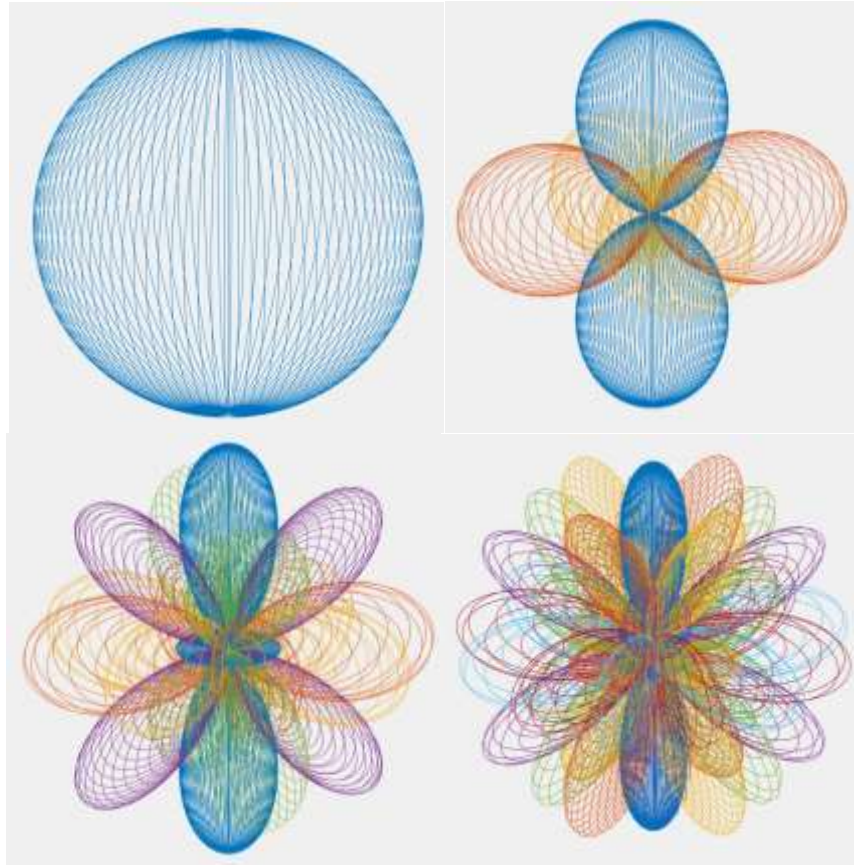
Para los orbitales  $f$  es decir  $l = 3$ :

```
r = sind(3*theta(n))*sind(phi(m))^3)^2;
r = (5*cosd(phi(m))*sind(phi(m))^2*cosd(2*theta(n)))^2;
r = ((5*cosd(phi(m))^2-1)*sind(phi(m))*sind(theta(n)))^2;
r = (5*cosd(phi(m))^3 - 3*cosd(phi(m)))^2;
r = ((5*cosd(phi(m))^2-1)*sind(phi(m))*cosd(theta(n)))^2;
r = (5*cosd(phi(m))*sind(phi(m))^2*sind(theta(n))*cosd(theta(n)))^2;
r = (cosd(3*theta(n))*sind(phi(m))^3)^2;
```



*Fig. 14 Orbitales  $l=3$ ,  $m=-3,-2,-1,0,1,2,3$   
Fuente: Propia elaborado en Matlab*

Simulando el modelo de cada orbital en Matlab, se puede observar las líneas de coordenadas que las forman, de esta forma considerar el desarrollo del código para Unity. A continuación, se observa los orbitales simultáneamente, por cada subnivel  $l$ , ajustando la escala de estos.



*Fig. 15 Orbitales s, p, d, f en Matlab  
Fuente: Propia elaborado en Matlab*

Estructurados los distintos orbitales se crea el script “MeshGenerator.cs”, el cual teniendo el algoritmo de coordenadas que se toman por ángulos en los respectivos ejes, variando estos para tener una mejor definición del modelo, a esta cantidad de datos por eje o definición la declaramos en el Script como una variable “d” la cual permitirá crear una malla de datos (como se muestra en la Fig. 10 Esquema malla de coordenadas).

```

for (int phi = 0; phi <= 360; phi += 360/d)
{
    for (int th = 0; th <= 180; th += 180/d)
    {
        switch (l)
        {
            case "s":
                if (m==0)
                    r = 1f;
                break;
            case "p":
                switch (m)
                {
                    case -1:
                        r = Mathf.Pow(Mathf.Sin(th * Mathf.Deg2Rad) * Mathf.Cos(phi * Mathf.Deg2Rad), 2f);
                        break;
                    case 0:
                        r = Mathf.Pow(Mathf.Cos(th * Mathf.Deg2Rad), 2f);
                        break;
                    case 1:
                        r = Mathf.Pow(Mathf.Sin(th * Mathf.Deg2Rad) * Mathf.Sin(phi * Mathf.Deg2Rad), 2f);
                        break;
                    default:
                        break;
                }
                break;
            case "d":
                switch (m)...
                break;
            case "f":
                switch (m)...
                break;
            default:
                break;
        }
        float px = r * Mathf.Sin(th * Mathf.Deg2Rad) * Mathf.Cos(phi * Mathf.Deg2Rad);
        float py = r * Mathf.Sin(th * Mathf.Deg2Rad) * Mathf.Sin(phi * Mathf.Deg2Rad);
        float pz = r * Mathf.Cos(th * Mathf.Deg2Rad);
        vertices[i] = new Vector3(px, py, pz);
        i += 1;
    }
}

```

Fig. 16 MeshGenerator.cs  
Fuente: Propia elaborado en Visual Studio

Es importante la cantidad de coordenadas de cada orbital ya que de estas dependen la cantidad de datos que maneja la simulación, con muy pocas generando deformaciones en cada modelo y en caso de ser muchos, el costo en la memoria y procesamiento de los datos, generando retrasos que perjudican la simulación fluida de los átomos, para ello esta cantidad se deja como variable permitiendo de manera sencilla variar la definición de cada orbital. En pocas palabras, implica que la función se tomara a distintos intervalos de grados, lo que conlleva a que la malla de coordenadas sea de distintas dimensiones.

La cantidad total de coordenadas se representa por  $(d + 1)^2$  y la cantidad de triángulos que la malla que se puede crear con estas  $2d^2$ , a su vez el patrón que construyen los átomos se repite la cantidad de veces que indica d.

Teniendo para los primeros dos triángulos que forman un cuadrado:

Triángulo 1  $[(d + 1) * n + t; (d + 1) * n + t + 1 + d; (d + 1) * n + t + 1]$

Triángulo 2  $[(d + 1) * n + t + 1; (d + 1) * n + t + 1 + d; (d + 1) * n + t + 2 + d]$

....

```
int v1 = Math.RoundToInt(6 * Math.Pow(d+1f, 2f));
triangulos = new int[2 * v1];
int ii = 0;
for (int n = 0; n < d; n++)
{
    for (int t = 0; t < d; t++)
    {
        if (derecho==true)
        {
            triangulos[0 + ii] = (d + 1) * n + t + 1;
            triangulos[1 + ii] = (d + 1) * n + t + 1 + d;
            triangulos[2 + ii] = (d + 1) * n + t;
            triangulos[3 + ii] = (d + 1) * n + t + 2 + d;
            triangulos[4 + ii] = (d + 1) * n + t + 1 + d;
            triangulos[5 + ii] = (d + 1) * n + t + 1;
            ii += 6;
        }
        else
        {
            triangulos[2 + ii] = (d + 1) * n + t + 1;
            triangulos[1 + ii] = (d + 1) * n + t + 1 + d;
            triangulos[0 + ii] = (d + 1) * n + t;
            triangulos[5 + ii] = (d + 1) * n + t + 2 + d;
            triangulos[4 + ii] = (d + 1) * n + t + 1 + d;
            triangulos[3 + ii] = (d + 1) * n + t + 1;
            ii += 6;
        }
    }
}
```

Fig. 17 MeshGenerator.cs  
Fuente: Propia elaborado en Visual Studio

Donde d es la cantidad de puntos por columna; n, t, el número de fila y columna en el que se encuentra.

Tomando

La Fig. 10,  $d = 3$ , puntos en que se divide la columna, teniendo un total de  $(d + 1)^2 = 16$  puntos en la malla, con los que se requiere un total de  $2d^2 = 18$  triángulos, con 3 datos de coordenadas para formar cada triángulo.

Los dos primeros triángulos están formados por las coordenadas  $[0,4,1]$   $[1,4,5]$  para el caso de la fila  $n=0$ , columna  $t=0$ . Y de esta manera hasta llegar a la fila y columna  $d-1$ .



Siguiendo este algoritmo y con los datos obtenidos por las funciones angulares  $Y_{m,l}$  se crean cada uno de los orbitales con la opción de variar las dimensiones de datos que la forman.

#### 4.4 GeoGebra

La función de onda  $\Psi$  no tiene sentido físico, de ser real indica la representación de un sistema de partículas, interpreta una partícula como una onda física que se propaga en el espacio.

La función de onda tiene lugares en los que es negativa, así como polos donde es cero, todo ello tiene significado en conceptos de física, más para que esta tenga relación a una figura física se aplica con otras operaciones.

La probabilidad radial  $4\pi r^2 R^2$  indica la probabilidad de que el electrón se sitúe a una distancia del núcleo particular independientemente de la dirección

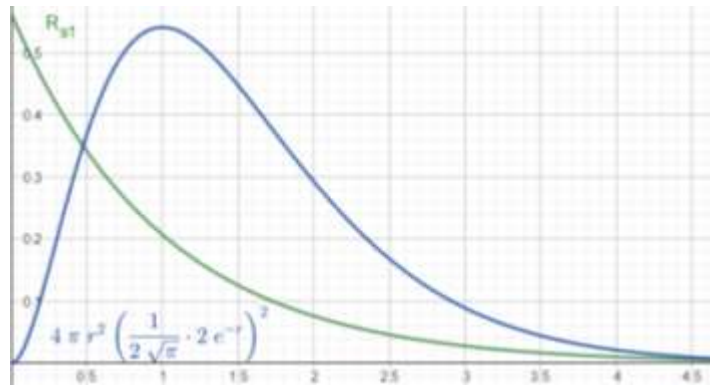


Fig. 18 Funciones de onda y de probabilidad radial para el orbital 1s  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra

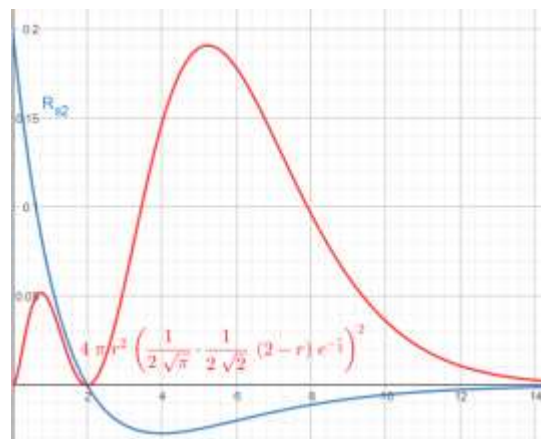
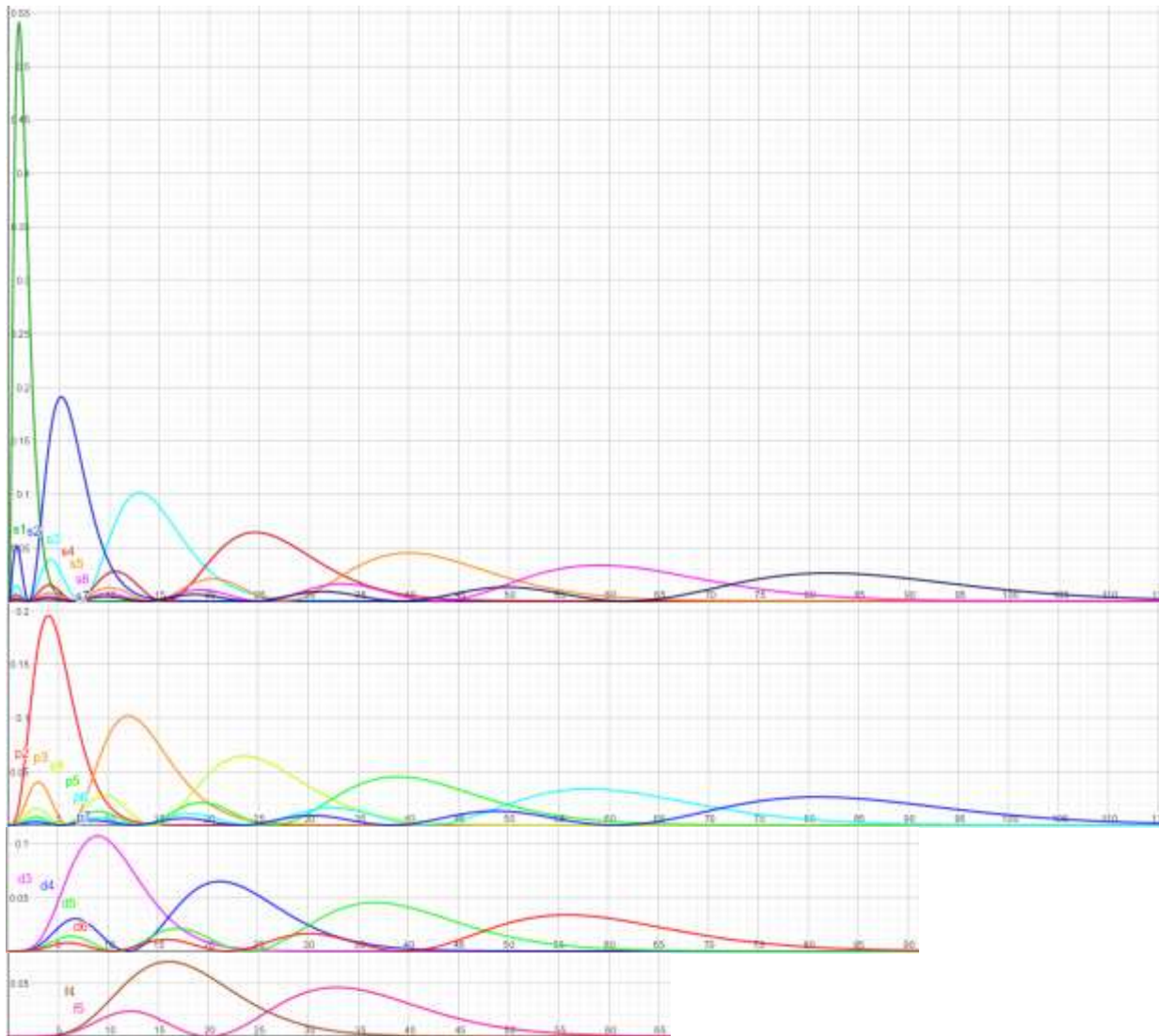


Fig. 19 Funciones de onda y de probabilidad radial para el orbital 2s  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra



*Fig. 20 Distribución radial de probabilidad  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra*

Con los datos obtenidos en las distribuciones radiales, las cuales representan la probabilidad de encontrar un electrón con relación a la distancia al núcleo, cuyas áreas bajo la curva desde 0 a infinito son iguales a 1, representando el 100% de probabilidad, es decir que se puede hallar un rango de radio cualquiera con el porcentaje de probabilidad que se desee, sin llegar a tener todo el porcentaje ya que tendería al infinito; así es como la función de onda angular halla un valor de radio( $r$ ) en que el área cubra un porcentaje de probabilidad elevado y con esto también aproximar una relación de tamaños entre los orbitales.

Con los datos obtenidos se procede a realizar lo modelos en Unity con las funciones comprobadas en Matlab, separando este proyecto en varias escenas, con un inicio, créditos y la escena principal donde se desarrollará la interacción de realidad aumentada.



## 4.5 Tamaño de los átomos

El Radio Atómico es la mitad de la distancia entre dos núcleos de átomos adyacentes unidos por un enlace covalente.

Propiedades del Radio Atómico:

- El Radio Atómico disminuye a lo largo de un mismo Periodo de la Tabla Periódica debido a que la carga nuclear va aumentando, atrayendo hacia el núcleo a los electrones externos
- El Radio Atómico aumenta hacia abajo a lo largo de un mismo Grupo o Columna de la Tabla Periódica debido a que se van añadiendo nuevas capas o niveles energéticos
- Por lo tanto: el Radio Atómico aumenta hacia abajo y hacia la izquierda en la Tabla Periódica
- El Radio Atómico puede explicar diferentes propiedades de los elementos como la densidad o los puntos de fusión o ebullición entre otros

A continuación, se muestra una tabla con los valores del Radio Atómico para los diferentes elementos de la Tabla Periódica medidos en Angstroms (Å):

$H_{0.79}^1$																	$He_{0.49}^2$
$Li_{2.05}^3$	$Be_{1.4}^4$											$B_{1.17}^5$	$C_{0.91}^6$	$N_{0.75}^7$	$O_{0.65}^8$	$F_{0.57}^9$	$Ne_{0.51}^{10}$
$Na_{2.23}^{11}$	$Mg_{1.72}^{12}$											$Al_{1.82}^{13}$	$Si_{1.46}^{14}$	$P_{1.23}^{15}$	$S_{1.09}^{16}$	$Cl_{0.97}^{17}$	$Ar_{0.88}^{18}$
$K_{2.77}^{19}$	$Ca_{2.71}^{20}$	$Sc_{2.09}^{21}$	$Ti_{2}^{22}$	$V_{1.92}^{23}$	$Cr_{1.85}^{24}$	$Mn_{1.79}^{25}$	$Fe_{1.77}^{26}$	$Co_{1.67}^{27}$	$Ni_{1.62}^{28}$	$Cu_{1.57}^{29}$	$Zn_{1.53}^{30}$	$Ga_{1.81}^{31}$	$Ge_{1.52}^{32}$	$As_{1.33}^{33}$	$Se_{1.22}^{34}$	$Br_{1.12}^{35}$	$Kr_{1.01}^{36}$
$Rb_{2.98}^{37}$	$Sr_{2.45}^{38}$	$Y_{2.27}^{39}$	$Zr_{2.16}^{40}$	$Nb_{2.08}^{41}$	$Mo_{2.01}^{42}$	$Tc_{1.95}^{43}$	$Ru_{1.89}^{44}$	$Rh_{1.83}^{45}$	$Pd_{1.79}^{46}$	$Ag_{1.75}^{47}$	$Cd_{1.71}^{48}$	$In_{2}^{49}$	$Sn_{1.72}^{50}$	$Sb_{1.53}^{51}$	$Te_{1.42}^{52}$	$I_{1.32}^{53}$	$Xe_{1.24}^{54}$
$Cs_{2.34}^{55}$	$Ba_{2.78}^{56}$	$Lu_{2.35}^{71}$	$Hf_{2.16}^{72}$	$Ta_{2.09}^{73}$	$W_{2.02}^{74}$	$Re_{1.97}^{75}$	$Os_{1.93}^{76}$	$Ir_{1.87}^{77}$	$Pt_{1.83}^{78}$	$Au_{1.79}^{79}$	$Hg_{1.76}^{80}$	$Tl_{2.08}^{81}$	$Pb_{1.81}^{82}$	$Bi_{1.63}^{83}$	$Po_{1.53}^{84}$	$At_{1.43}^{85}$	$Rn_{1.34}^{86}$
$Fr_{0.7}^{87}$	$Ra_{0.88}^{88}$	$Lr_{1}^{103}$	$Rf_{1.04}^{104}$	$Db_{1}^{105}$	$Sg_{1.06}^{106}$	$Bh_{1.07}^{107}$	$Hs_{1.08}^{108}$	$Mt_{1.09}^{109}$	$Ds_{1.10}^{110}$	$Rg_{1.11}^{111}$	$Cn_{1.12}^{112}$	$Nh_{1.13}^{113}$	$Fl_{1.14}^{114}$	$Mc_{1.15}^{115}$	$Lv_{1.16}^{116}$	$Ts_{1.17}^{117}$	$Og_{1.18}^{118}$
$La_{2.74}^{57}$	$Ce_{2.7}^{58}$	$Pr_{2.67}^{59}$	$Nd_{2.64}^{60}$	$Pm_{2.62}^{61}$	$Sm_{2.59}^{62}$	$Eu_{2.56}^{63}$	$Gd_{2.54}^{64}$	$Tb_{2.51}^{65}$	$Dy_{2.49}^{66}$	$Ho_{2.47}^{67}$	$Er_{2.45}^{68}$	$Tm_{2.42}^{69}$	$Yb_{2.4}^{70}$				
$Ac_{0.9}^{89}$	$Th_{0.9}^{90}$	$Pa_{0.91}^{91}$	$U_{0.92}^{92}$	$Np_{0.93}^{93}$	$Pu_{0.94}^{94}$	$Am_{0.95}^{95}$	$Cm_{0.96}^{96}$	$Bk_{0.97}^{97}$	$Cf_{0.98}^{98}$	$Es_{0.99}^{99}$	$Fm_{1.00}^{100}$	$Md_{1.01}^{101}$	$No_{1.02}^{102}$				

Fig. 21 Radio Atómico  
Fuente: Propia

Teniendo la relación de escala entre los orbitales, así como del tamaño de los átomos, todo se agrega al modelo en Unity, creando varias variables, que permitan crear los orbitales con la escala indicada por los datos obtenidos. Pese a que estos datos se basan en ecuaciones, no dejan de ser aproximaciones, estos ya sea porque se limita a un rango de probabilidad o por tomar escalas de tamaño de átomos que varían en función de temperatura, así como de otras propiedades.

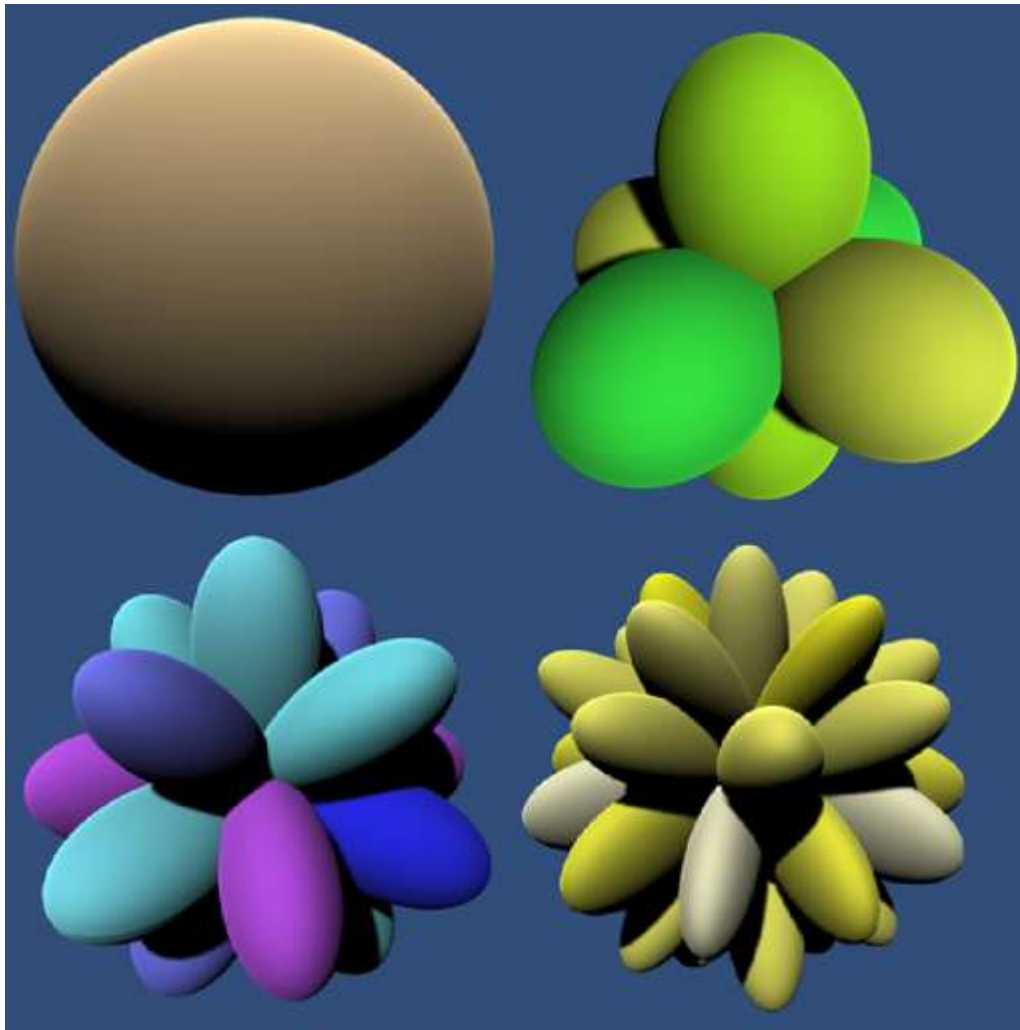
## 4.6 Modelos

Para el diseño de los orbitales, se toma en cuenta tanto la solución radial como la solución angular de la función de onda, empezando con la función angular que le da forma a cada orbital, ajustando escalas y la estructura atómica para seleccionar los orbitales.

### 4.6.1 Parte angular

Con las funciones angulares solución a la ecuación de ondas y Scripts desarrollados se crearon los modelos en Unity. Los cuales según su radio pueden contener el 90% de probabilidad de encontrar al electrón dentro de las figuras creadas por cada orbital

Aquí tenemos cada uno de los orbitales que formarían los subniveles  $s, p, d, f$ :



*Fig. 22 Orbitales  $s, p, d, f$  en Unity  
Fuente: Propia elaborado en Unity*

Estos subniveles se construyeron con sus respectivos orbitales, cada uno de ellos es construido por un script ya mencionado “MeshGenerator.cs”, este crea un orbital, el siguiente paso fue crear un script, que creara múltiples orbitales, en el orden respectivo de una estructura atómica, a las escalas dadas entre orbitales.

El script “Atomos.cs” crea los orbitales con el ya mencionado script “MeshGenerator”, en el orden respectivo del diagrama de Moeller, indicando los dos números cuánticos de cada orbital, es decir los números  $l$ ,  $m$  y la variable de cantidad de datos en la figura. Este script depende del número atómico del elemento a representar ( $Z$ ).

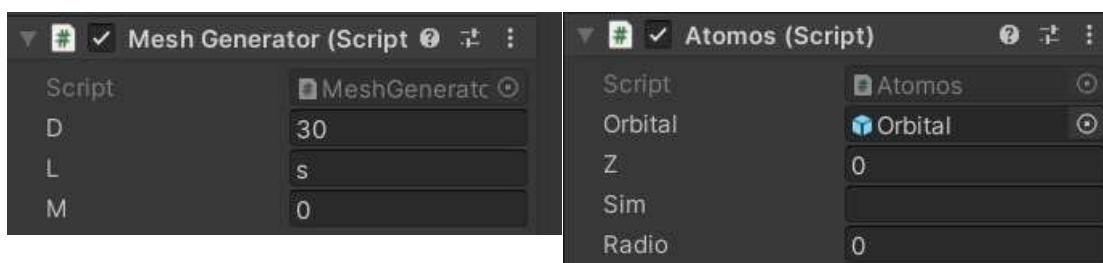
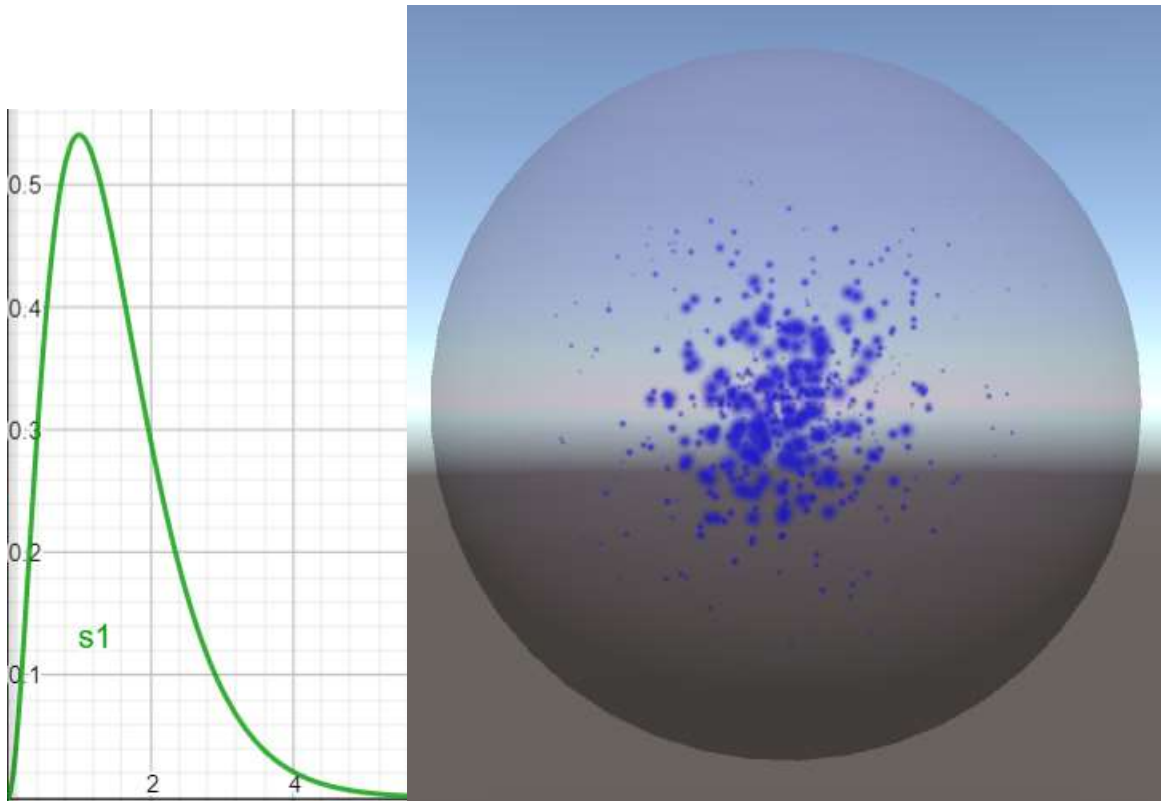


Fig. 23 Scripts MeshGenerator.cs y Atomos.cs  
Fuente: Propia elaborado en Unity

#### 4.6.2 Parte radial

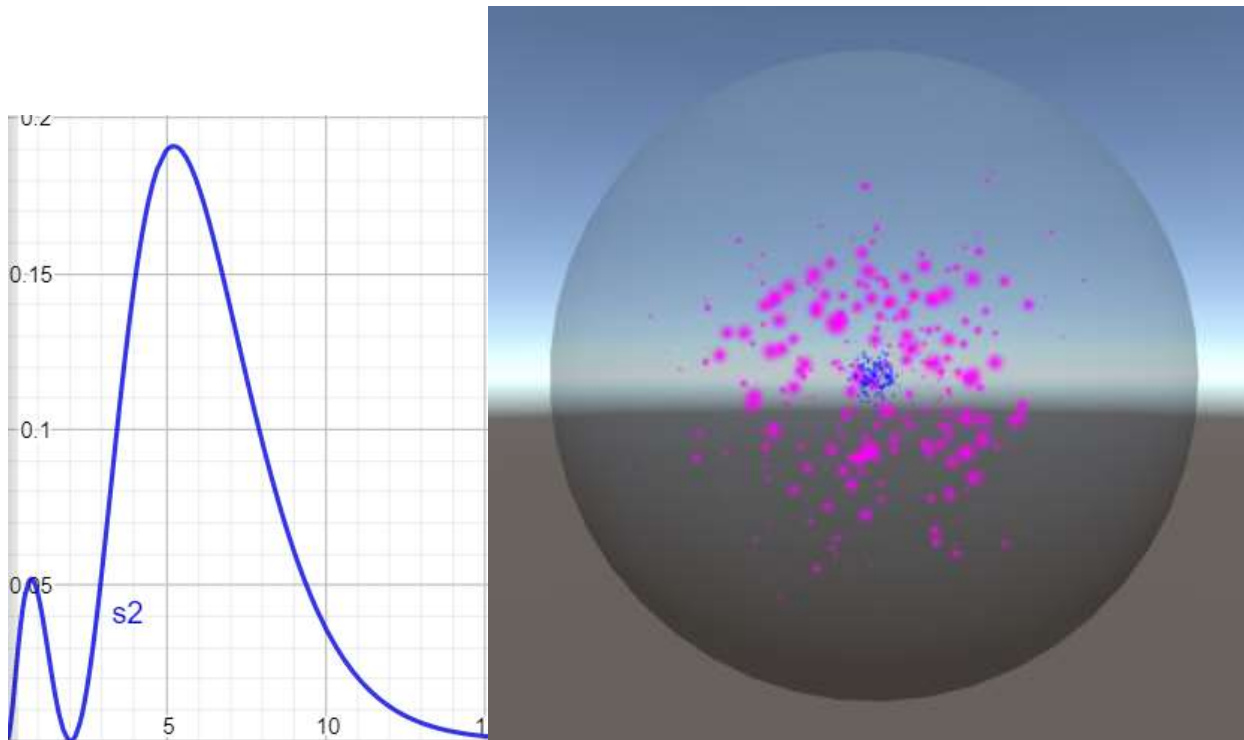
Con las funciones radiales y en conjunto a las funciones angulares se desarrolla un sistema de partículas para representar las probabilidades dentro de la figura de cada orbital, estas a diferencia de la solución angular varían con los números cuánticos,  $n$ ,  $l$ , como se muestra en la Tabla 1.

La estrategia usada para demostrar la densidad de probabilidad, según la distribución de cada orbital, se basa en generar puntos aleatorios variando en tamaño y cantidad, con respecto a la distancia que tenga al núcleo. Esta nube de probabilidad indica las posibles ubicaciones del electrón, teniendo en cuenta que bajo los términos cuánticos no podemos conocer su posición y su velocidad, se determina los posibles lugares en que se puede hallar, sin indicar como se mueve ni cómo puede verse este electrón visto como una onda que se comporta como partícula.

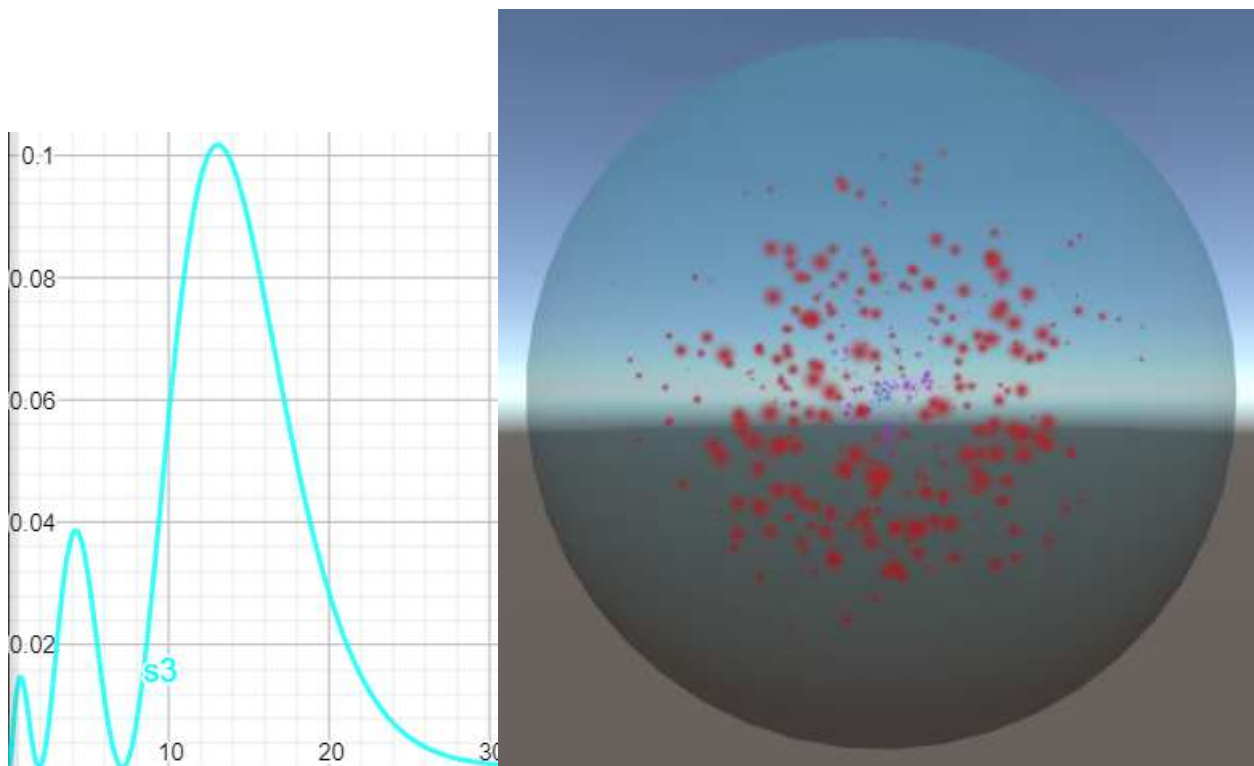


*Fig. 24 Probabilidad en el modelo orbital 1s  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity*

Como se muestra en la gráfica la distribución de probabilidad, en el núcleo tiene nula posibilidad de encontrar al electrón, sin embargo, es posible hallarlo muy cerca a este, para el caso del orbital 1s, lo cual cambia a medida que subimos de nivel energético en los orbitales tipo s, donde la probabilidad, se separa del núcleo a medida que se aumenta de nivel y se generan nodos de probabilidad nula en los distintos orbitales, también aplica para los demás tipos de orbitales. A continuación, las gráficas de distribución, con sus respectivos modelos en Unity.



*Fig. 25 Probabilidad en el modelo orbital 2s*  
*Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity*



*Fig. 26 Probabilidad en el modelo orbital 3s*  
*Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity*



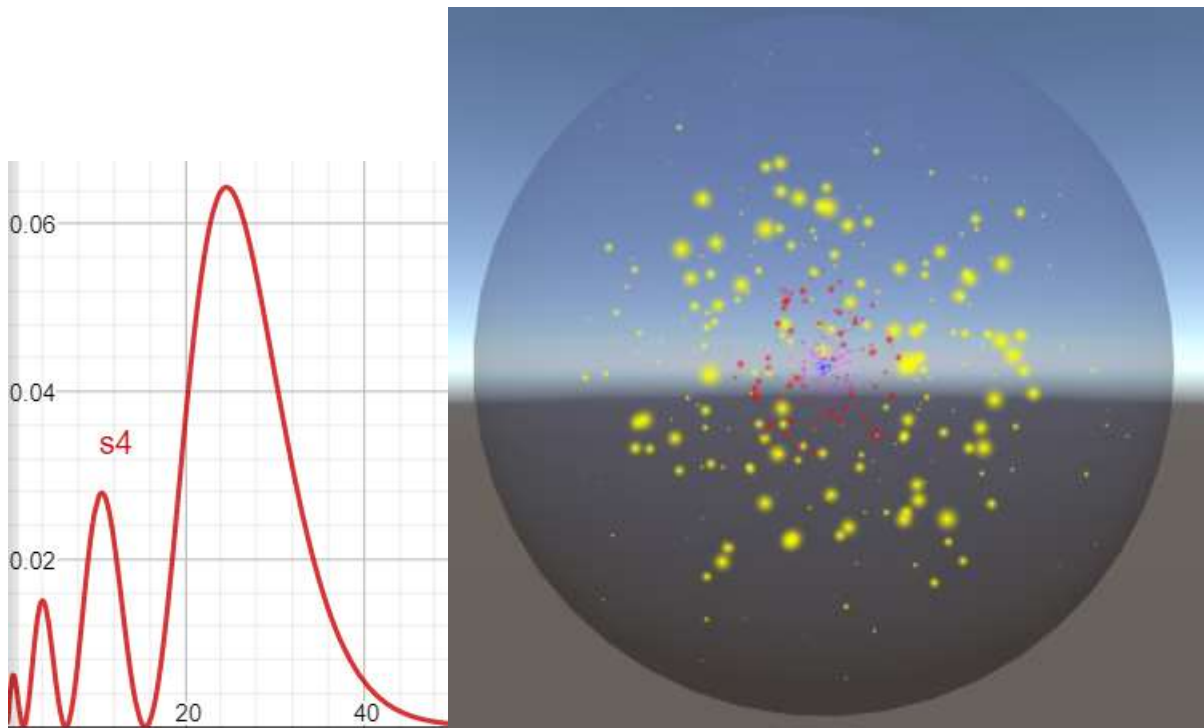


Fig. 27 Probabilidad en el modelo orbital 4s  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity

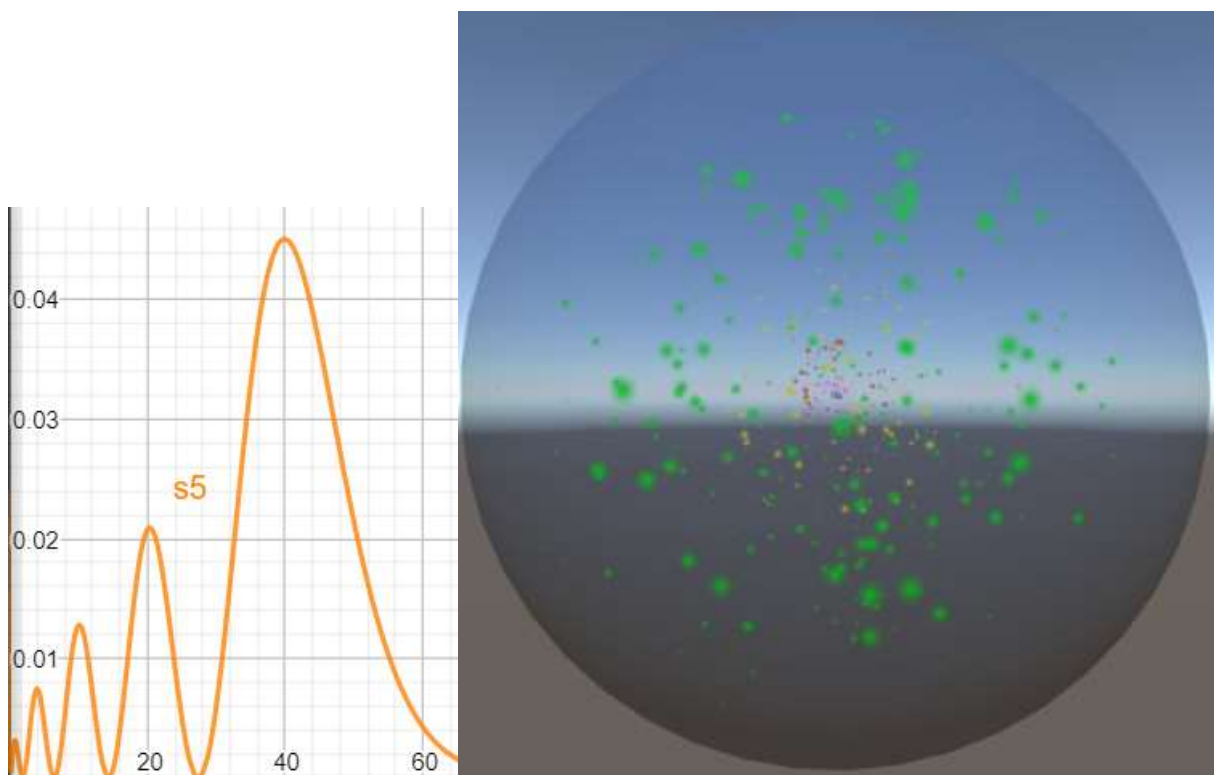
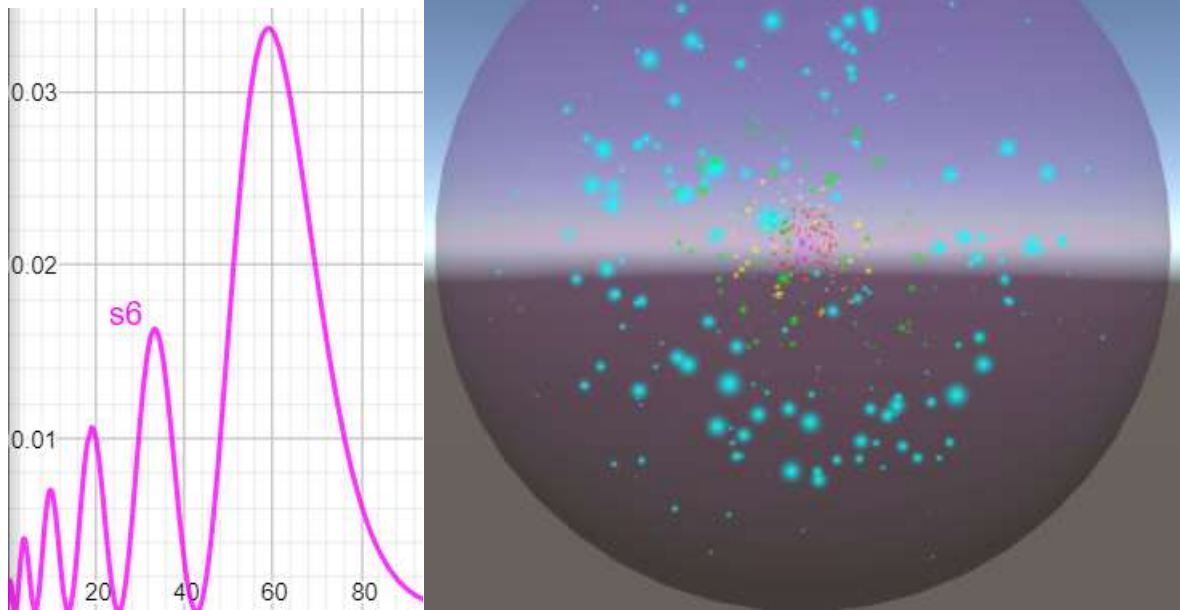
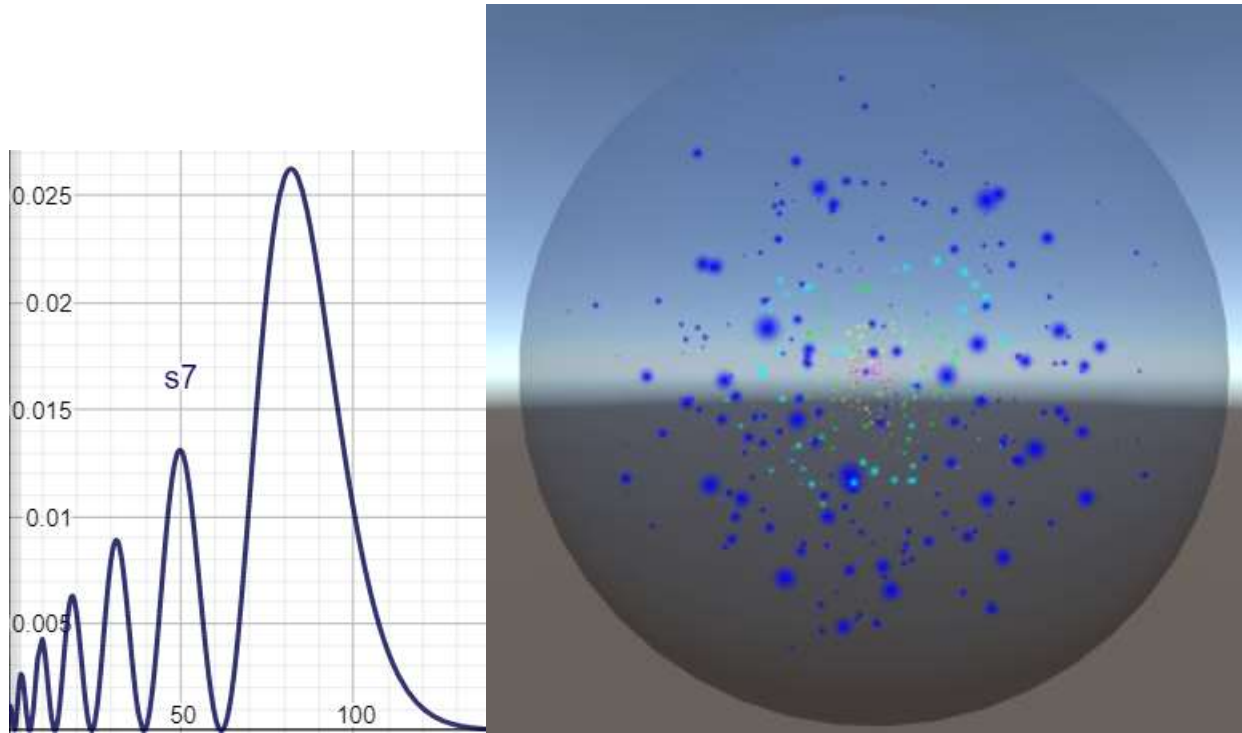


Fig. 28 Probabilidad en el modelo orbital 5s  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity

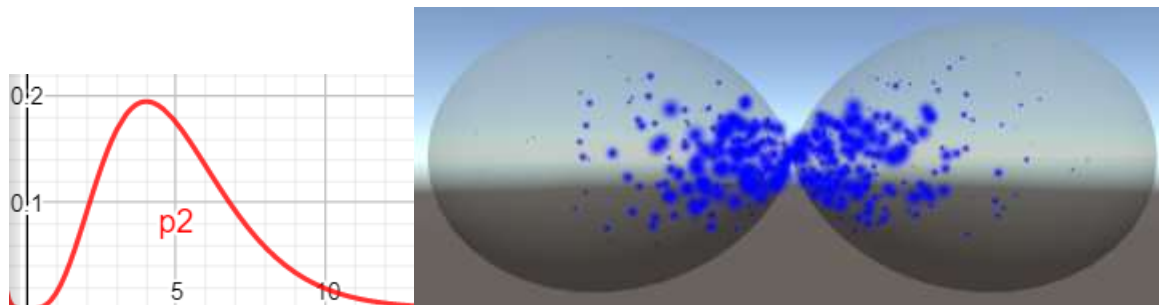


*Fig. 29 Probabilidad en el modelo orbital 6s*  
*Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity*



*Fig. 30 Probabilidad en el modelo orbital 7s*  
*Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity*

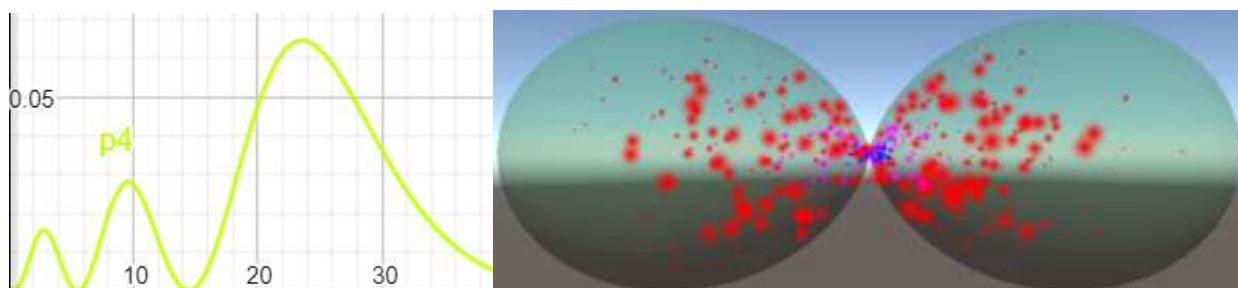




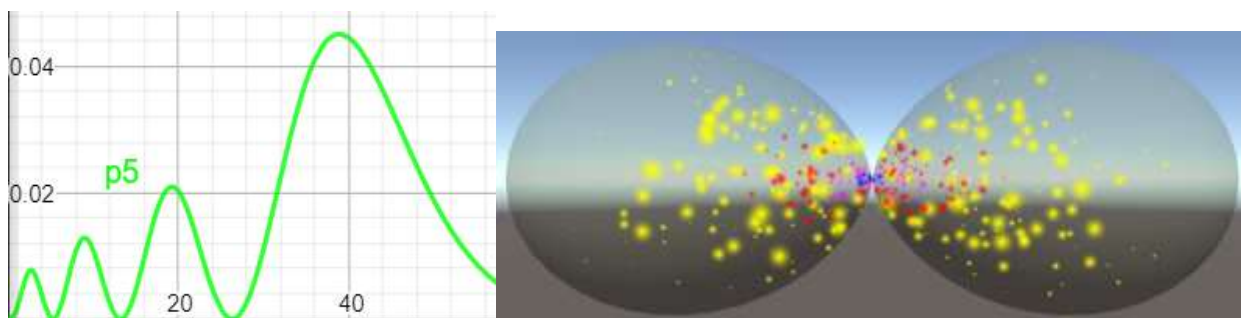
*Fig. 31 Probabilidad en el modelo orbital 2p*  
 Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity



*Fig. 32 Probabilidad en el modelo orbital 3p*  
 Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity



*Fig. 33 Probabilidad en el modelo orbital 4p*  
 Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity



*Fig. 34 Probabilidad en el modelo orbital 5p*  
 Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity

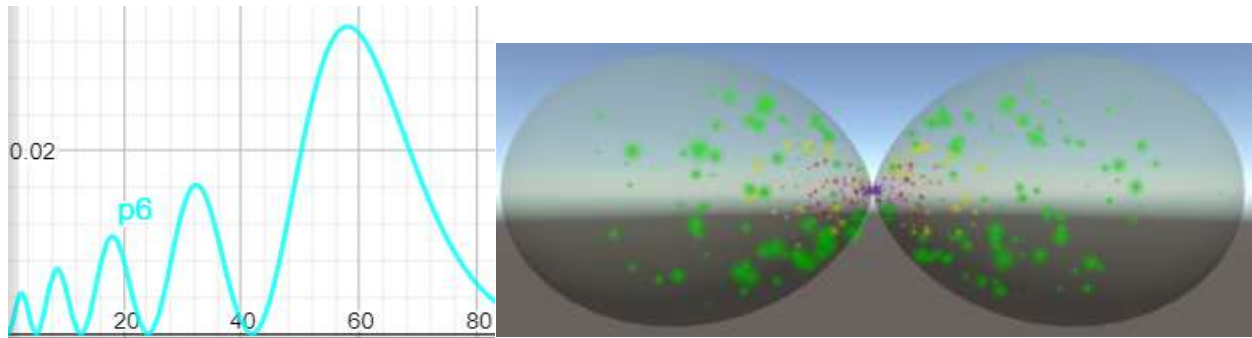


Fig. 35 Probabilidad en el modelo orbital 6p  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity

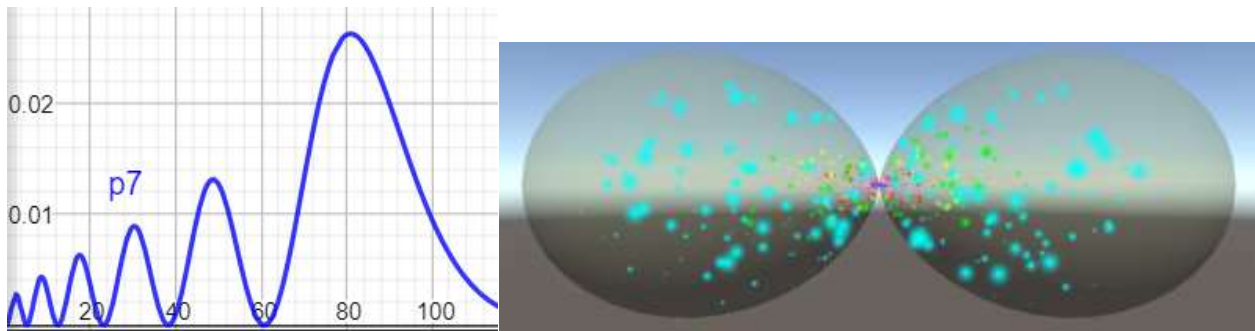


Fig. 36 Probabilidad en el modelo orbital 7p  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity

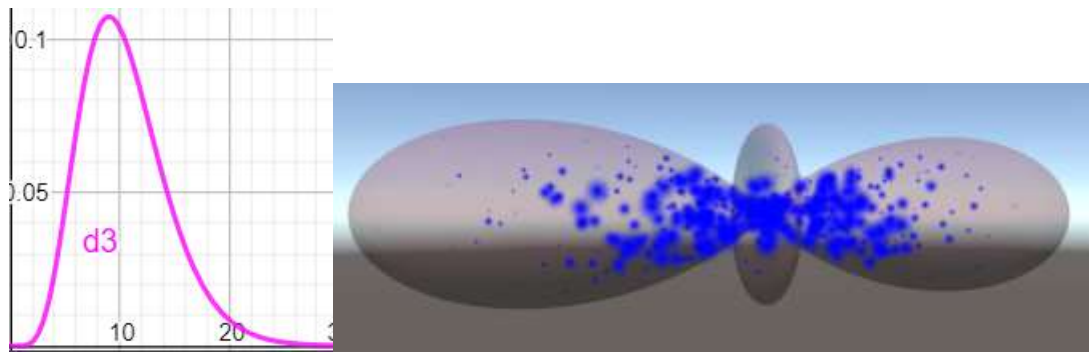


Fig. 37 Probabilidad en el modelo orbital 3d  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity

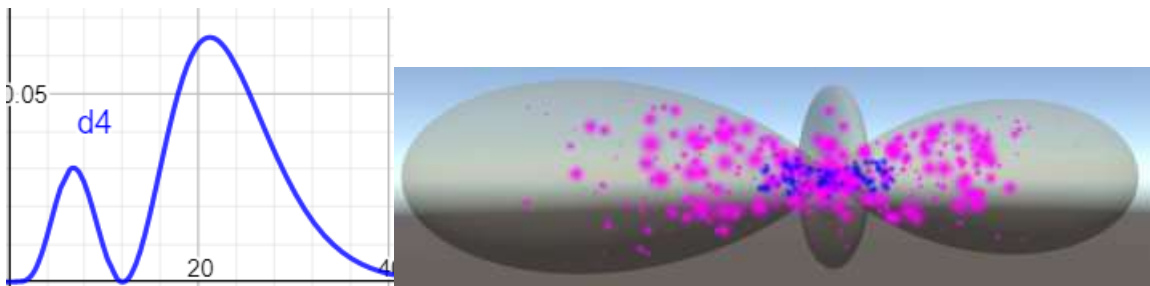


Fig. 38 Probabilidad en el modelo orbital 4d  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity

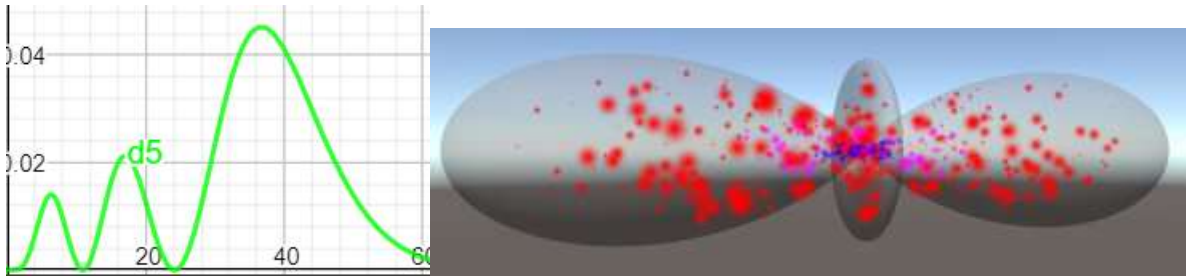


Fig. 39 Probabilidad en el modelo orbital 5d  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity

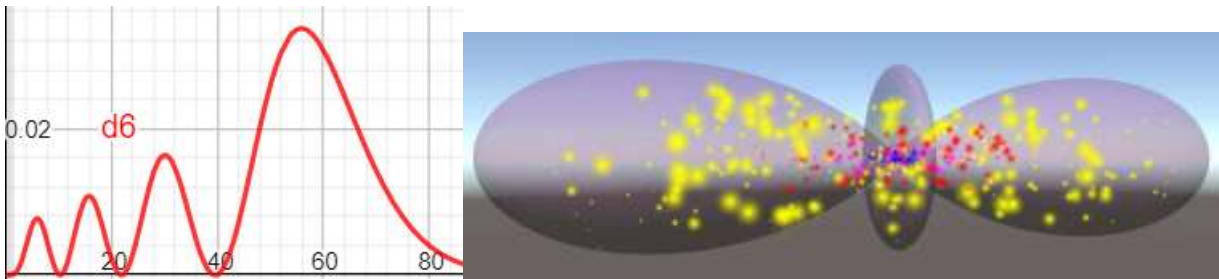


Fig. 40 Probabilidad en el modelo orbital 6d  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity

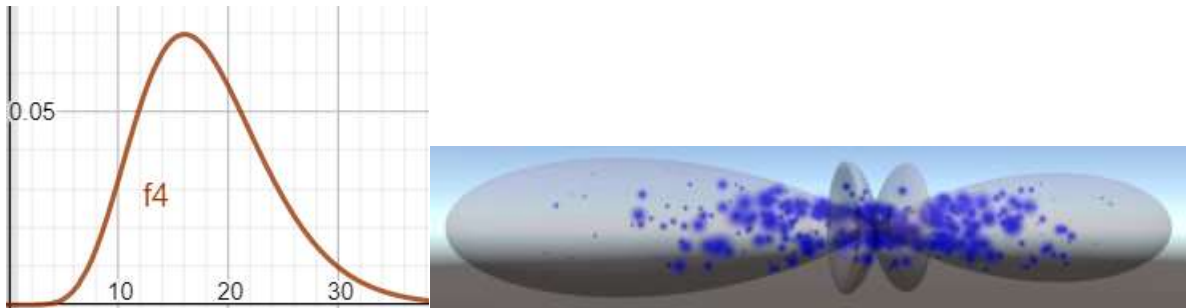


Fig. 41 Probabilidad en el modelo orbital 4f  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity

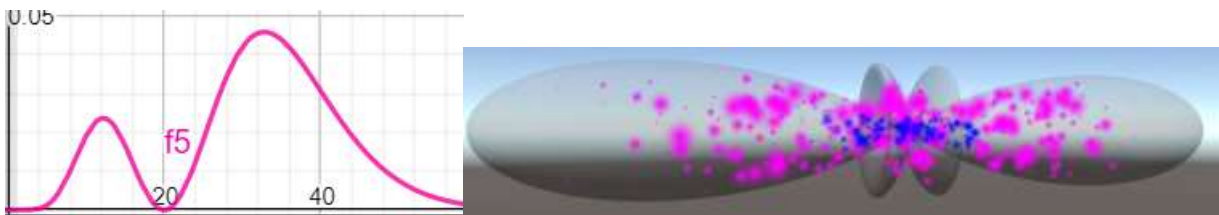


Fig. 42 Probabilidad en el modelo orbital 5f  
Fuente: Propia elaborado en GeoGebra y Unity

### 4.6.3 Consideraciones átomos polielectrónicos

La aplicación de la Mecánica Cuántica a los átomos polielectrónicos es un procedimiento matemático muy complejo. Para un átomo con N electrones, su ecuación de Schrödinger tendrá 3N coordenadas, además hay que tener en cuenta la atracción coulombica del núcleo hacia todos y cada uno de los electrones, así como las repulsiones de cada electrón con todos los restantes. Esto implica que la solución de la ecuación de Schrödinger para los átomos polielectrónicos es inviable, por lo que es necesario el uso de modelos aproximados.

La aproximación orbital en este modelo supone que las funciones de onda de un átomo polielectrónico, con N electrones, pueden escribirse como el producto de N funciones de onda monoeléctricas (de átomos hidrogenoides), ya que se consideran a los N electrones independientes unos de otros.

La aproximación orbital tiene gran importancia porque nos permite describir la estructura electrónica de un átomo de forma cualitativa con gran acierto, mediante la descripción de su configuración, es decir, indicando los orbitales hidrogenoides ocupados por los electrones pertenecientes al átomo. Por lo general, cuando se habla de la configuración electrónica de un átomo, se hace referencia al estado de mínima energía (estado fundamental).

Los subniveles de energía presentan un orden basado en el diagrama de Moeller, en los cuales, siguiendo una serie de reglas, como que en cada orbital puede contener uno o dos electrones, así como otras reglas nemotécnicas que indican variaciones en el orden de los subniveles como se muestran en el siguiente gráfico.

Para el último elemento su configuración electrónica no presenta cambios en el orden de energía de los orbitales mostrando así todos los subniveles en el orden normal.

*Oganesón*  $Og$   $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 5f^{14} 6d^{10} 7p^6$

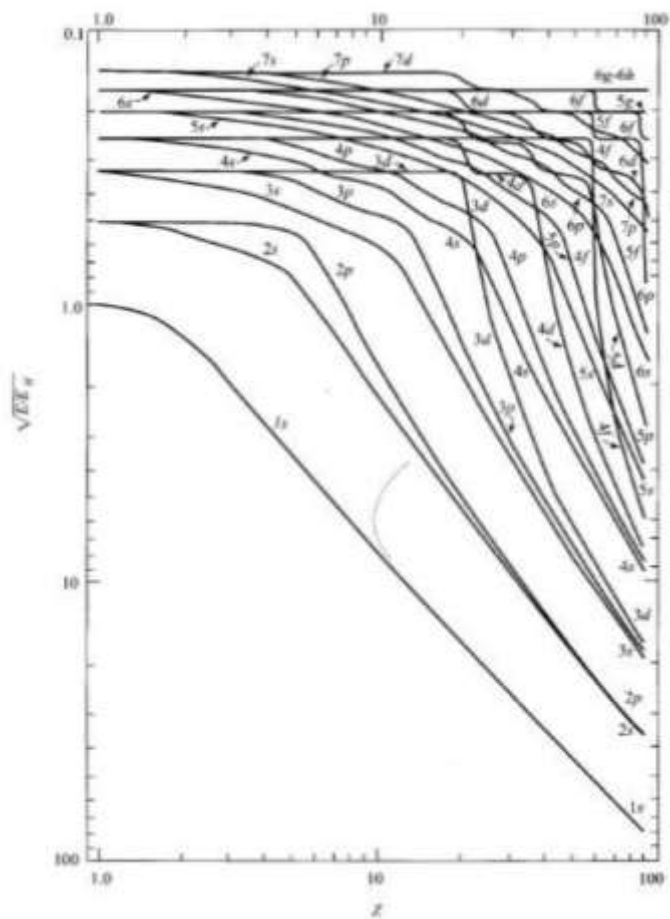


Fig. 43 Orden de energía de los orbitales  
Fuente: Química Física

En esta gráfica se observa cómo se altera el orden para los orbitales con base al número atómico, para alguno de los elementos presentaría variaciones en casos excepcionales, a continuación, se tratará los elementos varían.

		24 <b>Cr</b> Cromo 4s <sup>1</sup> 3d <sup>5</sup>							29 <b>Cu</b> Cobre 4s <sup>1</sup> 3d <sup>10</sup>
	41 <b>Nb</b> Niobio 5s <sup>1</sup> 4d <sup>4</sup>	42 <b>Mo</b> Molibdeno 5s <sup>1</sup> 4d <sup>5</sup>		44 <b>Ru</b> Rutenio 5s <sup>1</sup> 4d <sup>7</sup>	45 <b>Rh</b> Rodio 5s <sup>1</sup> 4d <sup>8</sup>	46 <b>Pd</b> Paladio 4p <sup>6</sup> 4d <sup>10</sup>	47 <b>Ag</b> Plata 5s <sup>1</sup> 4d <sup>10</sup>		
						78 <b>Pt</b> Platino 4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup>	79 <b>Au</b> Oro 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup>		
103 <b>Lr</b> Lawrencio 5f <sup>14</sup> 7p <sup>1</sup>						110 <b>Ds</b> Darmstadtio 5f <sup>14</sup> 6d <sup>9</sup>			
								64 <b>Gd</b> Gadolinio 4f <sup>7</sup> 5d <sup>1</sup>	
	57 <b>La</b> Lantano 6s <sup>2</sup> 5d <sup>1</sup>	58 <b>Ce</b> Cerio 4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup>							
	89 <b>Ac</b> Actinio 7s <sup>2</sup> 6d <sup>1</sup>	90 <b>Th</b> Torio 7s <sup>2</sup> 6d <sup>2</sup>	91 <b>Pa</b> Protactinio 5f <sup>2</sup> 6d <sup>1</sup>	92 <b>U</b> Uranio 5f <sup>3</sup> 6d <sup>1</sup>	93 <b>Np</b> Neptunio 5f <sup>4</sup> 6d <sup>1</sup>				96 <b>Cm</b> Curio 5f <sup>7</sup> 6d <sup>1</sup>

Fig. 44 Elementos con Variación de energía  
Fuente: Propia

La mayoría de los elementos no presenta ninguna variación con el diagrama de *Moeller*, pero los siguientes elementos sí cambian el orden.

<i>Cromo</i>	<i>Cr</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$
<i>Cobre</i>	<i>Cu</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$
<i>Niobio</i>	<i>Nb</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 4d^4$
<i>Molibdeno</i>	<i>Mo</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 4d^5$
<i>Rutenio</i>	<i>Ru</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 4d^7$
<i>Rodio</i>	<i>Rh</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 4d^8$
<i>Paladio</i>	<i>Pd</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 4d^{10}$
<i>Plata</i>	<i>Ag</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 4d^{10}$
<i>Lantano</i>	<i>La</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 5d^1$
<i>Cerio</i>	<i>Ce</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^1 5d^1$

<i>Gadolinio</i>	<i>Gd</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 \mathbf{4f^7 5d^1}$
<i>Platino</i>	<i>Pt</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 \mathbf{6s^1 4f^{14} 5d^9}$
<i>Oro</i>	<i>Au</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 \mathbf{6s^1 4f^{14} 5d^{10}}$
<i>Actinio</i>	<i>Ac</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 \mathbf{6d^1}$
<i>Torio</i>	<i>Th</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 \mathbf{6d^2}$
<i>Protactinio</i>	<i>Pa</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 \mathbf{5f^2 6d^1}$
<i>Uranio</i>	<i>U</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 \mathbf{5f^3 6d^1}$
<i>Neptunio</i>	<i>Np</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 \mathbf{5f^4 6d^1}$
<i>Curio</i>	<i>Cm</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 \mathbf{5f^7 6d^1}$
<i>Lawrencio</i>	<i>Lr</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 5f^{14} \mathbf{7p^1}$
<i>Darmstatio</i>	<i>Ds</i>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 \mathbf{7s^1 5f^{14} 6d^9}$

Se resalta en negrilla los subniveles que se alteran, estas variaciones se presentan en el modelo final en el script *Atomos.cs*.

## 4.7 Escenas

### 4.7.1 Principal

#### 4.7.1.1 Herramientas

En la escena principal, con los modelos orbitales, es necesario el uso de distintas herramientas que faciliten el manejo de la app, se tomaron las modificaciones básicas como ubicar y cambiar de posición el modelo completo del átomo, lo que implica también cambiar la escala en la que se observa y finalmente como herramienta de apoyo para indicar los niveles de energía y poder observarlos, una herramienta que permita habilitar y deshabilitar cada orbital individualmente.





*Fig. 45 Diseño escena Cargar Atomos*  
*Fuente: Propia*

En esta escena se puede acceder a las opciones de la aplicación en la esquina superior izquierda encontramos el menú de tabla periódica y orbitales, en la esquina superior derecha, encontramos un botón para reubicar el lugar en el ambiente físico en el que se simula el modelo, en la esquina inferior izquierda, la opción para cambiar la escala de la simulación y finalmente en la esquina inferior derecha, un botón para salir de la simulación, al inicio de la aplicación. Como información se muestra en la parte inferior un texto para el tamaño del radio atómico del elemento que se visualiza.

#### Ubicación



*Fig. 46 Icono Ubicar*  
*Fuente: Flaticon*

Al presionar este botón se cambia el programa a detectar un nuevo plano para poder ubicar o reubicar el átomo a visualizar.

Es en este proceso de ubicar el objeto a visualizar, que se ejecuta la función de realidad aumentada, inicialmente para buscar superficies planas con la cámara del dispositivo, que se representaran con una platilla (Fig. 47) de una imagen que digitalmente se dibujaran



sobre la superficie detectada por la cámara. Este se ejecutará al iniciar la aplicación ya que de ello dependen las demás herramientas.

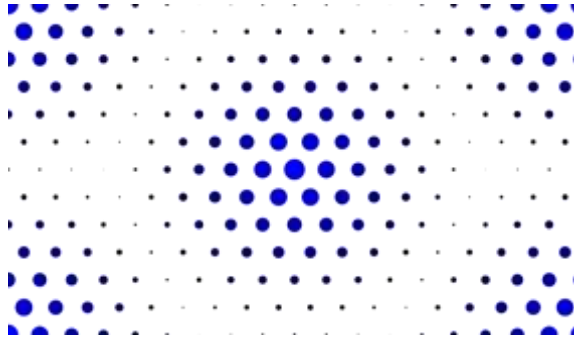


Fig. 47 Plano sobre superficie  
Fuente: Propia

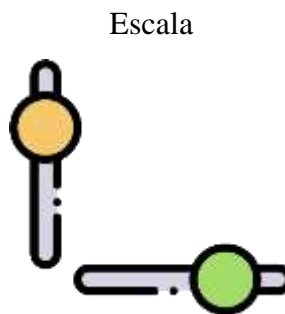


Fig. 48 Icono Escala  
Fuente: propia

Con esta herramienta se podrá variar la escala del modelo a observar con la relación desde  $1\text{\AA} : 1\text{cm}$  hasta  $1\text{\AA} : 20\text{cm}$ , al presionar la pantalla mostrará un Slider con un botón para volver al menú principal.

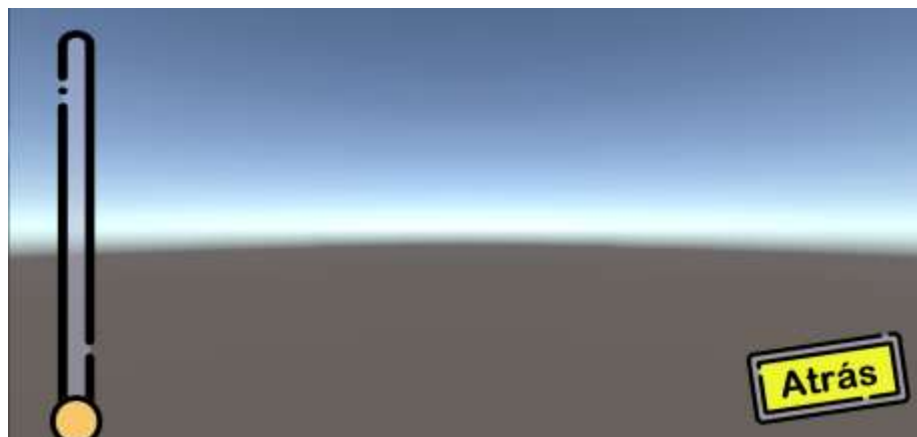


Fig. 49 Escala atómica  
Fuente: Propia

## Configuración

En esta herramienta se encuentra la herramienta principal en ella se modifica el elemento y lo que se ve de él, presenta cincuenta y nueve botones por cada orbital posible, cada uno se encarga de ocultar o mostrar un orbital, en una tabla que también representa por su posición el orden energético desde abajo con el orbital que primero se ocupa. Se tiene un botón que muestra el elemento, con su número, nombre, radio y símbolo, se puede cambiar el elemento, presionando sobre el símbolo o sobre el nombre, desplegando una tabla periódica o presionando sobre el número para escribir directamente un número.

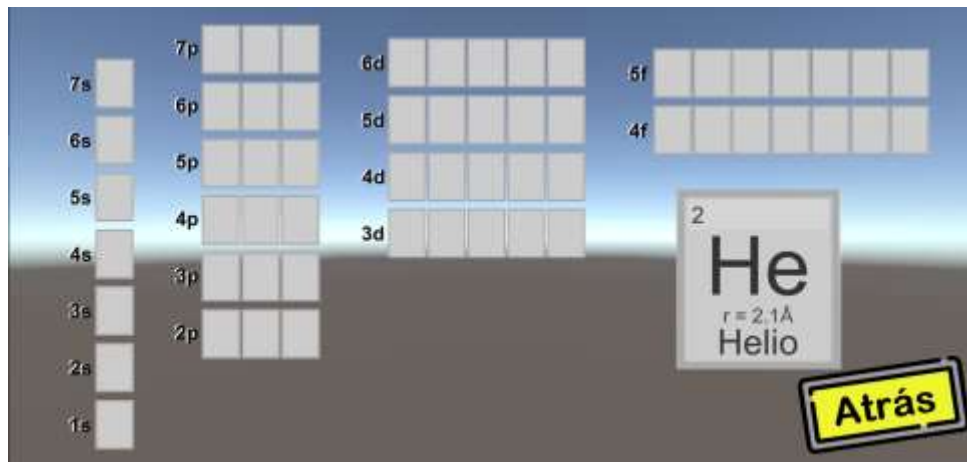


Fig. 50 Menú Orbitales - Elemento  
Fuente: propia

Esta ventana permite cambiar con el número atómico el elemento del átomo que se desea observar, así como se pueden activar o desactivar las capas de orbitales que lo forman, esto denotado con la configuración electrónica en diagrama de orbitales, teniendo así la notación por spin de cada orbital.

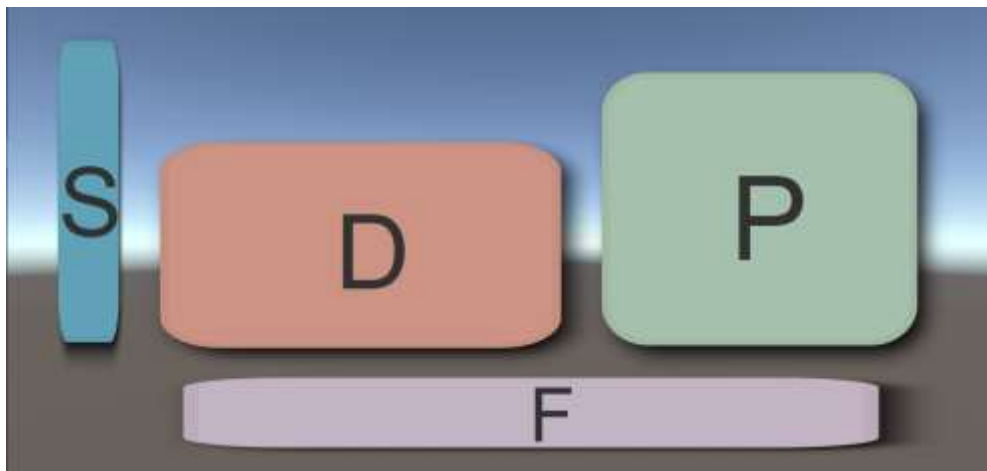


Fig. 51 Notación de Spin  
Fuente: propia

Denotando si en el orbital como se observa en la imagen se encuentran ninguno, uno o dos electrones, respectivamente, donde también muestra el cuarto número cuántico de cada electrón, el número “s” el spin o momento angular.

Los tres números cuánticos principales, ya estarían denotados en los orbitales donde tenemos el número “n”, representando el nivel de capa del orbital; el número “l”,

representando el tipo de orbital s, p, d o f; el tercer número cuántico que depende del segundo es “ $m$ ”, representando el sentido y la forma de la subcapa en la que se encuentra el electrón. Los cuatro números principales son únicos para cada electrón, los cuales con ecuaciones avanzadas representan cambios en las cualidades del electrón.



*Fig. 52 Miniatura Tabla Periódica  
Fuente: propia*

Menú intermedio para seleccionar una sección de la tabla periódica, para cambiar de elemento en la simulación. En este se dividen los ciento dieciocho elementos, para pantallas pequeñas separando la tabla periódica en cuatro según su último subnivel.

#### 4.7.2 Inicio

Al empezar a usar la aplicación nos muestra un menú de inicio con el nombre del programa un espacio para seleccionar el átomo antes de entrar en la escena principal, así como dos botones uno que inicia el programa de realidad aumentada donde se observan los modelos, y uno para salir.

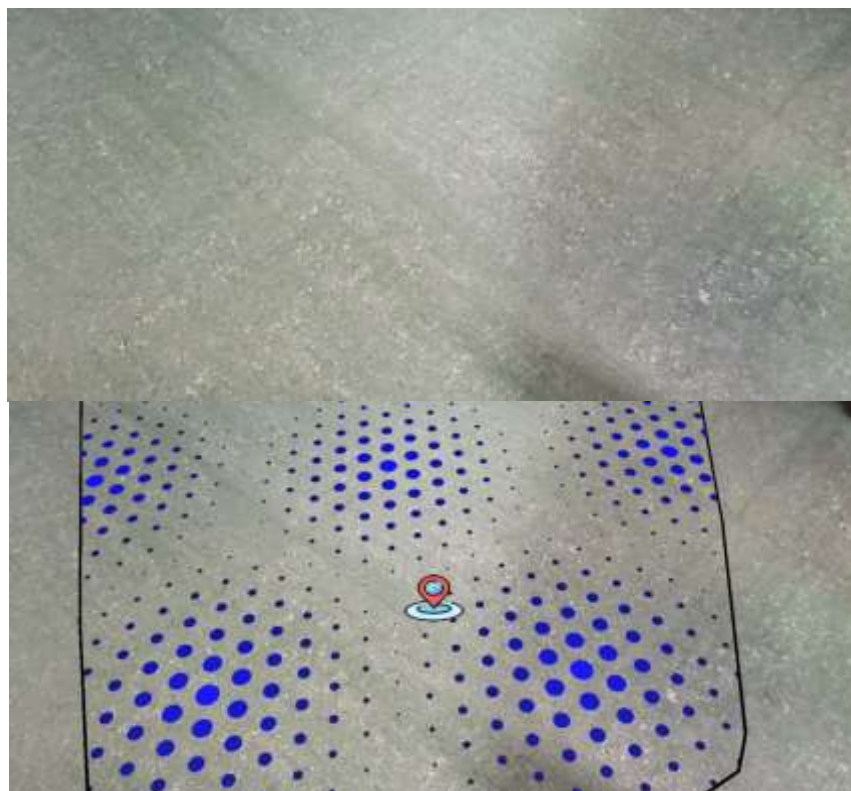


*Fig. 53 Inicio de App*  
*Fuente: Propia elaborada en Unity*

## 5 Resultados

En la aplicación OrbitAR se puede visualizar un modelo cuántico de los átomos mediante realidad aumentada, con ayuda de un dispositivo móvil. En este programa podemos interactuar con los átomos de forma virtual en el mundo real, por medio de un dispositivo móvil. Este, aunque no es la delimitación del trabajo, es una clara herramienta didáctica, que se puede usar para enseñar los modelos tanto en el área de química o física como en otras disciplinas que lo requieran. De este modo la herramienta supone unos conceptos básicos de química de nivel educación básica y media, para comprenderlo, pero que a su vez implican teorías de física cuántica, representadas físicamente, por lo cual también se podría mostrar con detalle, conceptos avanzados, desde esta aplicación.

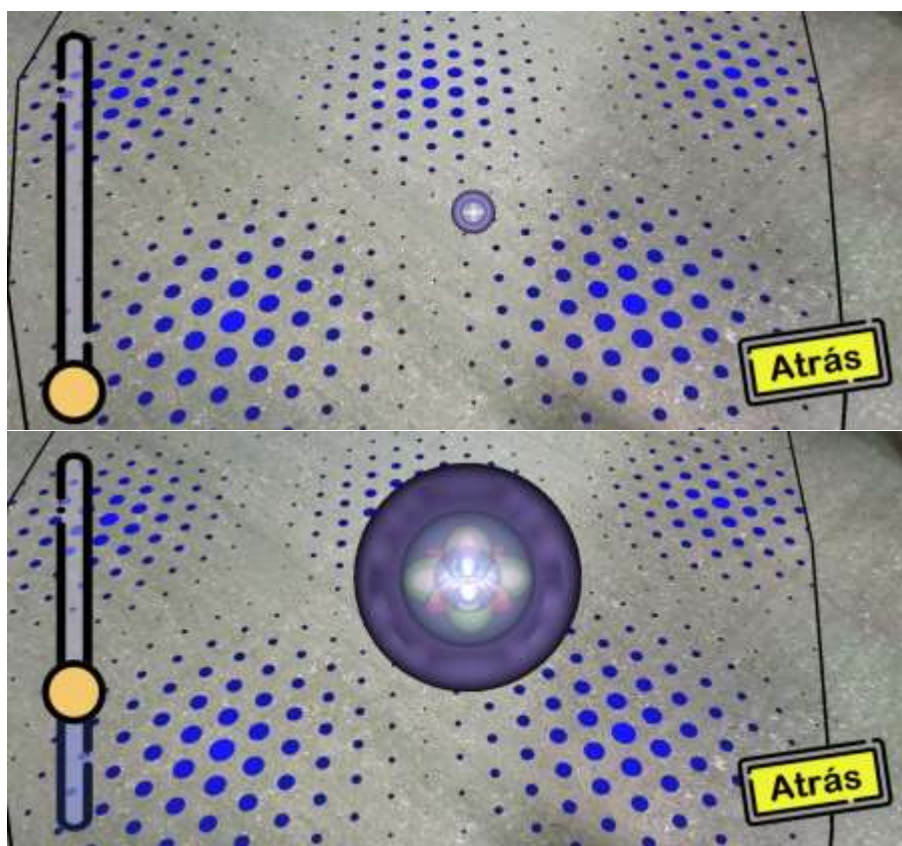
La aplicación contiene el ambiente de realidad aumentada en una única ventana en la cual podemos escanear el entorno en busca de superficies planas, lugar donde se digitaliza los modelos, lo cual habilita una variedad de herramientas para interactuar, tales como el cambio de escala y la edición de capas, así como el cambio de elemento a observar.



*Fig. 54 Detectando superficie  
Fuente: propia*

Al escanear el entorno buscando superficies planas se presenta con un patrón, bidimensional que se sitúa sobre los planos detectados y se genera un icono en el centro de la pantalla, que nos indica el lugar en donde se situara el modelo atómico.

El cambio de escala tiene gran utilidad teniendo en cuenta que se puede situar el modelo sobre una mesa siendo pertinente un modelo pequeño, o sobre el piso, paredes es decir lugares amplios para lo cual se expande el modelo.



*Fig. 55 Escala átomo de Titanio  
Fuente: propia*

El control de orbitales presenta gran facilidad para observar niveles subniveles y orbitales, desde un mismo menú en el cual, se presenta desde el comienzo la respuesta angular de todos los orbitales del elemento seleccionado.



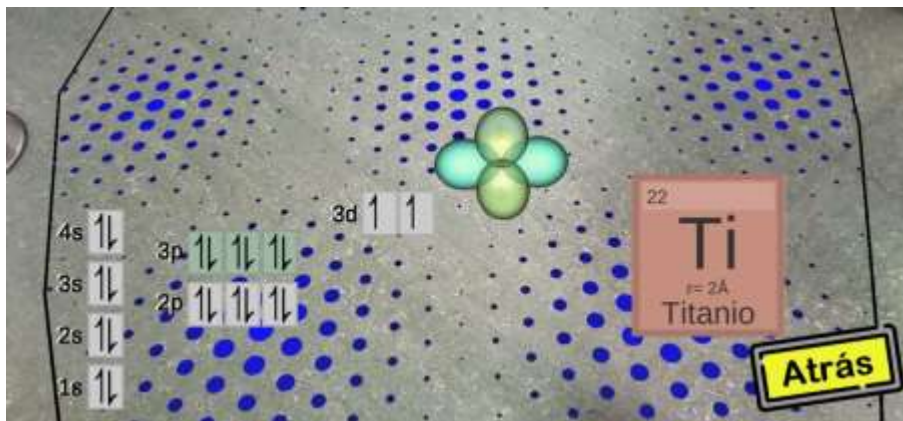


Fig. 56 Subnivel 3p  
Fuente: propia

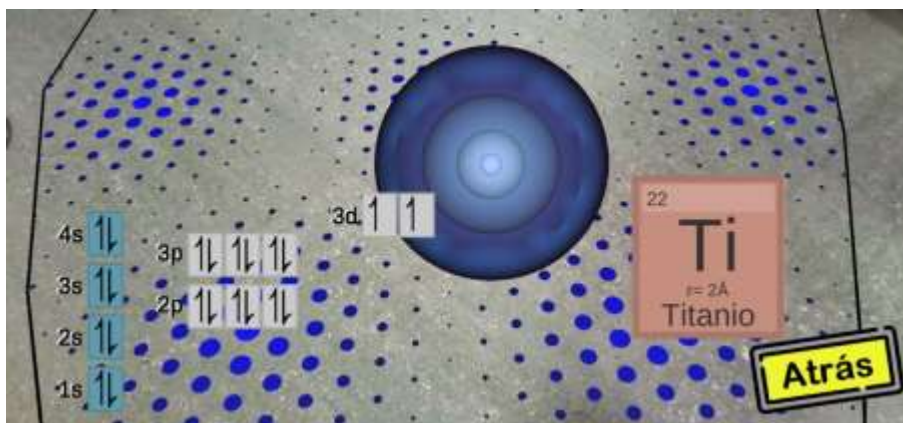


Fig. 57 orbitales  $l=0$   
Fuente: propia

Los orbitales pueden ser cargados mostrando la estructura atómica, mientras se observa escalas entre orbitales, así como entre elementos al cambiar el modelo a visualizar.

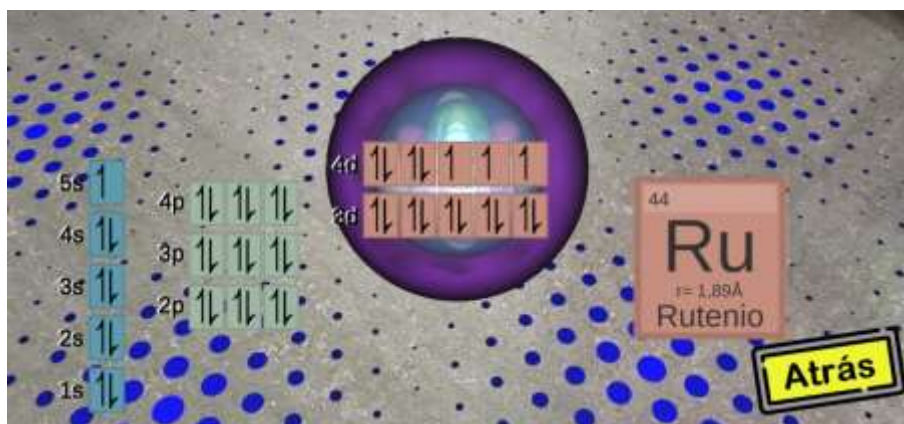
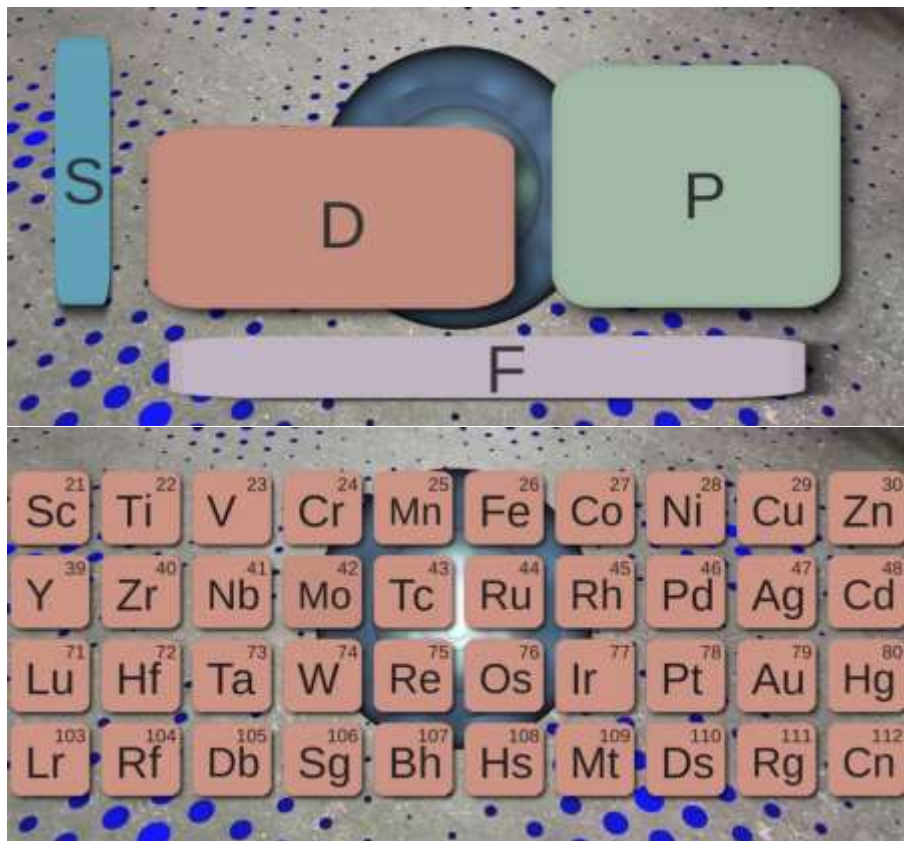


Fig. 58 Átomo de Rutenio  
Fuente: propia

El menú de tabla periódica facilita el cambio de modelo, viendo la tabla periódica por secciones.



*Fig. 59 Menú Tabla Periódica  
Fuente: propia*

Para acceder a la respuesta angular de cada orbital, teniendo en cuenta la estrategia de puntos de probabilidad, se mantiene presionado el orbital a observar durante dos segundos, modo en el que solo se admite visualizar un orbital a la vez, ya que las transparencias incurren a confusión al ver varios al tiempo. Para volver al modo angular se mantiene del mismo modo presionado cualquier orbital por dos segundos.





Fig. 60 Orbital 4d m=0 respuesta radial  
Fuente: propia

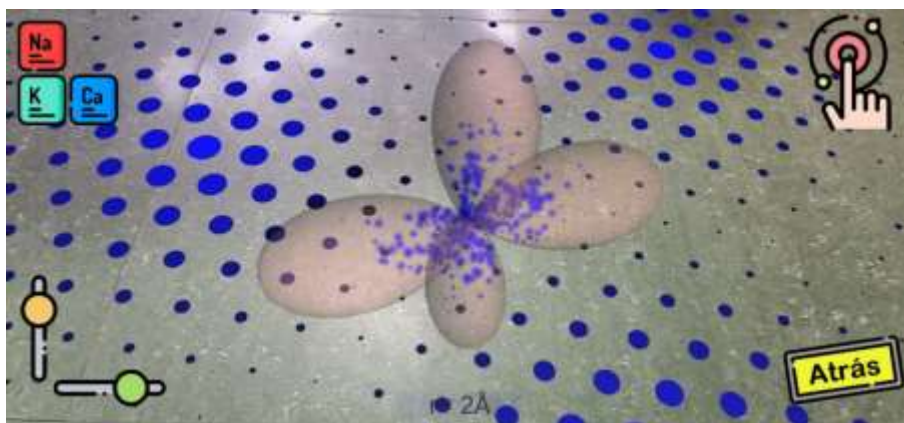


Fig. 61 Orbital 4d m=-2  
Fuente: propia

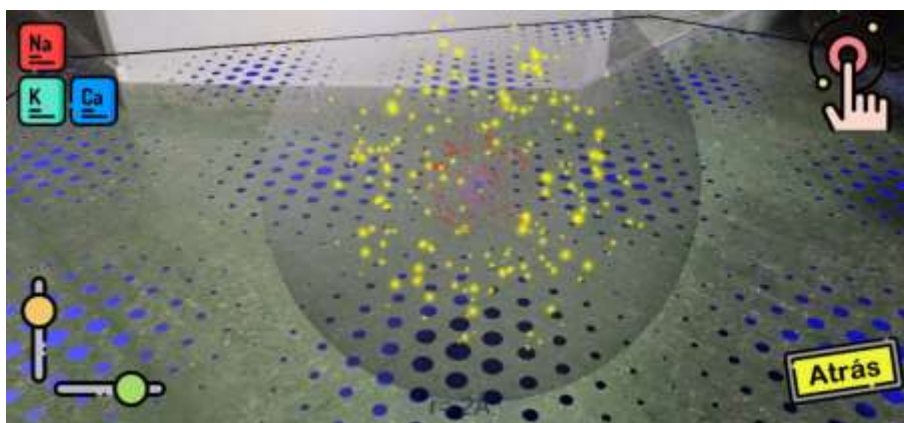


Fig. 62 Orbital 4s

## 6 Conclusiones

Se creó una aplicación que muestra cada uno de los átomos de la tabla periódica actual, con el modelo atómico cuántico, como la construcción de varias figuras de probabilidad u orbitales, permitiendo observar cada elemento, así como la distribución electrónica. Para cada elemento se maneja un conjunto de orbitales, los cuales se simularon con precisión matemática, teniendo en cuenta escalas y formas, provenientes de las funciones de onda que las describen, de las teorías de estructuras atómicas y de la estrategia de visualización para un modelo tridimensional, de esta manera se obtiene la estructura por orbitales de cada uno de los ciento dieciocho elementos de la tabla periódica actual.

La estrategia de realidad aumentada diseñada desde AR Foundation y AR Core, permite interactuar con el modelo orbital, de forma tal que se puede visualizar cualquier elemento, ver los niveles subniveles y orbitales de forma grupal o individual, así como ver la distribución de probabilidad por cada orbital en tres dimensiones. La interfaz de usuario presenta las herramientas de la aplicación en pocos pasos de forma sencilla, permitiendo cambiar de elemento, o la visualización con un menú de pocos elementos.

Este trabajo presenta un punto de convergencia entre teorías del modelo cuántico, estructuras atómicas, así como una herramienta para distintas disciplinas, en documentos y libros sintetizan información del modelo cuántico, realizando análisis en las propias ecuaciones o hablando de características y parámetros de los orbitales, tratando poco el aspecto gráfico. Generar un modelo en realidad aumentada presenta una gran ventaja para enseñar y presentar de forma simple, temas tan complejos, que permiten explicar conceptos, de química básica hasta teorías cuánticas desde el modelo físico, los trabajos en realidad aumentada previos a este se basan en modelos clásicos, que permiten en teoría describir el átomo, pero que terminan siendo una notación que solo expresa algunas cualidades del modelo actual.

Teniendo en cuenta que el desarrollo del modelo atómico cuántico se presenta desde 1926, no se ha desarrollado proyectos como este, ya que para fines educativos se plantean todas las características de estos modelos, en cuanto a el modelo físico, en esquemas bidimensionales, en los que se plantean sus características y formas teóricas. En la actualidad se pueden encontrar videos, imágenes o paginas que integran algunas estrategias para mostrar el modelo de

Schrödinger, sin embargo, la interacción con un modelo tridimensional es nula, además de que se recurre a mostrar los orbitales individualmente y se separa la respuesta angular de la radial.

Esta aplicación tiene una clara connotación a la educación, por ello este trabajo puede ser implementado, estudiando la respuesta a una estrategia basada en esta herramienta. Así como para herramientas didácticas que partan del modelo cuántico, como representaciones de campos o fuerzas del átomo, incluso modelos moleculares, de estructuras o corrientes eléctricas. Este trabajo puede avanzar en términos de química o física, ya que en solo el área de química se podría tratar desde las variaciones que puede presentar cada elemento al retirar o añadir electrones, así como en el modelado de moléculas, teniendo la interacción entre dos o más átomos, así como de otros temas de reacciones químicas. Por el lado de la física se podría añadir al modelo fuerzas que interactúan con las distintas partículas subatómicas, así como en nuevas teorías que se tienen, como la ecuación de Dirac, que implica un estudio más detallado de este mismo modelo, que entre sus resultados vinculan el spin, que antes se tenía como una propiedad matemática, la cual ahora se vería como una consecuencia de aplicar las propiedades relativistas en la cuántica y finalmente la antimateria.

Las posibilidades de desarrollo de esta herramienta son exorbitantes, no solo mostrando el modelo, también la representación de otros fenómenos atómicos, desde la electricidad, a la estructura de la materia y sus propiedades. Sin mencionar nuevas teorías que impliquen mayor precisión al describir un modelo del átomo, como bien puede ser la teoría de cuerdas que habla de una descripción en más de 4 dimensiones.

## 7 Referencias

Alcañiz, E. (2003). *Química inorgánica I*.

C, C., & A K, H. (1975). *Modern inorganic chemistry*. BUTTERWORTHS.

L. G., W. (2011). *Química Orgánica*. México: PEARSON.

Merino, C., Pino, S., Meyer, E., Garrido, J. M., & Gallardo, F. (2014). *Realidad aumentada para el diseño de secuencias de enseñanza-aprendizaje en química*. Valparaíso: Pontificia Universidad Católica. Obtenido de [https://www.researchgate.net/publication/317439642\\_Realidad\\_aumentada\\_para\\_el\\_diseño\\_de\\_secuencias\\_de\\_enseñanza-aprendizaje\\_en\\_química](https://www.researchgate.net/publication/317439642_Realidad_aumentada_para_el_diseño_de_secuencias_de_enseñanza-aprendizaje_en_química)

p. c. (19 de 03 de 2015). *Dáskalos*. Obtenido de <https://www.youtube.com/watch?v=gMxdBdLpVgc>

Rodríguez Rojas, J. G., & Valencia Cristancho, M. K. (2014). *Ambiente virtual de aprendizaje basado en tecnologías de realidad aumentada como estrategia didáctica para el aprendizaje de la configuración de algunas moléculas del estudio de la química*. Bogotá: UNIVERSIDAD PEDAGOGICA NACIONAL. Obtenido de <http://hdl.handle.net/20.500.12209/1915>

Roqueta , L. (2017). *Aumentando la realidad química*. Valencia. doi:<https://doi.org/10.4995/msel.2017.7056>

Setiawan, A., Rostianingsih, S., & Widodo, T. R. (2017). *Implementation of Chemical Reaction Based On Augmented*. Surabaya: Petra Christian University. Obtenido de <http://repository.petra.ac.id/id/eprint/17823>

Tech, V. (22 de 10 de 2017). *AR Chemistry Augmented Reality Education Arloon*. Obtenido de <https://www.youtube.com/watch?v=Qi3h18wJJiI>

Valdes Julio, D. S., & Muñoz Gutiérrez, J. A. (2020). *Aplicación de realidad aumentada para la elaboración de experimentos de química como herramienta de apoyo en la enseñanza de los tipos de reacciones según la organización de los átomos, para noveno grado de*

*bachillerato*. Cundinamarca: Universidad de Cundinamarca. Obtenido de <http://hdl.handle.net/20.500.12558/2920>

Valdes Julio, D. S., & Muñoz Gutiérrez, J. A. (25 de 02 de 2020). *UdeC*. Obtenido de <http://hdl.handle.net/20.500.12558/2920>

Briceño B. Carlos Omar. *Química Orgánica- Inorgánica*. Segunda Edición. Editorial Educativa, 1999.

Mc Murry, John. *Química Orgánica*. Sexta Edición. México: Thomson, 2004.

Tipos de Realidad Aumentada según sus formas de utilización. IMASCONO TEAM. 2017 <https://imascono.com/es/magazine/realidad-aumentada-segun-utilizacion>