

A TÁBOA PERIÓDICA NA ERA DO *MACHINE LEARNING*

MARTÍNEZ NÚÑEZ, EMILIO

*Departamento de Química Física, Facultade de Química.
Universidade de Santiago de Compostela.*

1. INTRODUCCIÓN

Cando se me propuxo escribir este capítulo acerca do que significa para min, un químico que desenvolve modelos e traballa con computadores, a táboa periódica, non sabía moi ben por onde empezar. Con todo, pronto descubrín que Mendeleev, deseñador da táboa periódica no ano 1869 o que fixo foi racionalizar, ordenar e mesmo predicir os elementos químicos, accións que tamén leva a cabo un químico teórico cando pretende entender por exemplo as reaccións químicas, como é o meu caso. Por outra banda, a táboa periódica é como unha ecuación matemática que condensa moito do coñecemento existente sobre os elementos químicos. A maioría dos químicos e físicos teóricos que traballan con átomos ou moléculas non fan nin máis (nin menos) que iso: constrúen modelos (escritos na linguaxe matemática) que codifican coñecemento e teñen a capacidade de predicir comportamentos futuros.

2. A INFORMACIÓN CONTIDA NA TÁBOA PERIÓDICA

Como se comentará mais abaixo a información contida na táboa periódica é de moita importancia na química, de xeito que pode ser incorporada nos modelos mais sofisticados de *Machine Learning* para facer predicións sobre as propiedades da materia.

Mentres que no século XVI a química estaba aínda ancorada na alquimia, a física xa incorporara o método científico de medicións cuantitativas e aplicación das matemáticas que forman parte de toda ciencia. Non foi ata que o químico irlandés Roberto Boyle comezase os seus estudos dos gases no século XVII en que a transición da química cara ao método científico se levou a cabo. A partir de aí, as cuantificacións e desenvolvemento de modelos e teorías (do mesmo xeito que na física) comeza tamén a ser algo habitual na química.

Os científicos comezaron a teorizar sobre a química e facer hipóteses sobre cousas que aínda non podían medir, pero que servían para explicar a realidade. Iso era o que realmente permitía (e

permite a día de hoxe) o avance da ciencia. O químico ruso Dimitri Mendeleev supón un exemplo excelente coa súa clasificación dos elementos no ano 1869 en columnas ou grupos e filas ou períodos que comparten certas propiedades determinando o estado físico dos elementos e a súa reactividade química, é dicir, a súa capacidade de formar ligazóns químicas con outros átomos.

A táboa periódica supón unha ordenación dos elementos de acordo ao seu número atómico ou número de protóns (aínda que no seu momento Mendeleev cría que os estaba ordenando polas súas masas). Como moi ben expresa Carbo-Dorca e Chkraborty nun artigo recente,¹ o conxunto de números atómicos da táboa periódica Θ é un subconxunto dos números naturais ($\Theta \in \mathbb{N}$) que expresamos como:

$$\Theta = [Z = 1; 118 \mid \Delta = 1]$$

No seu artigo, Carbo-Dorca e Chkraborty fan unha reflexión interesante en relación con números atómicos que se corresponden con números primos e que describirei aquí brevemente.

Dos 118 elementos da táboa periódica hai 29 números primos, sendo por tanto a probabilidade de que un número primo apareza na mesma de 29/118, que é aproximadamente 0.25 (do mesmo orde que a probabilidade de que salga un número concreto cando se lanza un dado por exemplo).

O que resulta realmente curioso é o feito de que os grupos 1 e 13 aparecen con catro números primos cada un, tendo en conta que a probabilidade de que 4 números primos aparezan no mesmo grupo é de aproximadamente un 0.4 % soamente.

Máis sorprendente aínda son os oito novos números primos que aparecen na extensión da táboa periódica feita por Pyykkö no ano 2011 ata o elemento de $Z = 172$ a partir de predicións teóricas baseadas en cálculos moi sofisticados.² Talvez esta riqueza de números atómicos primos sexa só o azar, ou talvez sexa un patrón como o que atopou no seu momento o químico alemán Johann Wolfgang Dobereiner en triadas de elementos antes de que Mendeleev propuxese a táboa periódica. Neste último caso merecería a penar facer unha análise máis detallada.

3. A MIÑA VISIÓN DA TÁBOA PERIÓDICA

Falarei aquí da miña visión ou relación particular coa táboa periódica, empezando desde a época de estudante, pasando polos meus inicios como estudante de doutoramento en química teórica/computacional ata a actualidade, onde levo a cabo a miña investigación no desenvolvemento de modelos teóricos e programas computacionais para o estudo da reactividade química.

Como estudante, unha das cousas que máis me chamaba a atención (e que máis utilizaba) era a información que proporciona acerca da configuración electrónica dos elementos, é dicir, como se organizan os electróns dentro dos mesmos. Outra información moi relacionada coa configuración electrónica, e que tamén chamaba a miña atención, era a predición da reactividade dos elementos. Este interese non era algo pasaxeiro posto que é neste campo da reactividade química no que levo traballando nos últimos 25 anos e no que me vou centrar neste capítulo.

A táboa periódica construíuse baseándose no coñecemento químico acumulado e non foi ata principios do século XX cando o nacemento da mecánica cuántica permitiu explicar cun adoitado modelo matemático o patrón seguido pola táboa periódica. O uso de métodos heurísticos baseados no coñecemento químico é moi útil tamén na química computacional de hoxe en día como indicaremos mais abaixo.

Un modelo que me fascinou de estudante pola súa sinxeleza foi o modelo do átomo desenvolto en 1913 polo científico danés Niels Bohr, que mostraba o átomo cun núcleo central contendo protóns

e neutróns, cos electróns orbitando os núcleos en capas concéntricas, de forma similar a como os planetas orbitan ao redor do sol. Cada capa de electróns tiña un nivel de enerxía diferente, coas capas máis próximas ao núcleo sendo máis baixas en enerxía. A capa máis próxima ao núcleo podía albergar dous electróns, a seguinte oito e a terceira dezoito. Doutra banda, o número de electróns na capa máis externa determinaba a súa reactividade. Esta capa máis externa coñécese como capa de valencia, e os electróns que se atopan nela chámanse electróns de valencia. En xeral, os átomos son máis estables, menos reactivos, cando a súa capa de electróns máis externa está chea.

Se consideramos só as dúas primeiras filas da táboa periódica, que inclúen os elementos principais importantes para a vida, cada fila corresponde ao enchido dunha capa electrónica diferente: o helio e o hidróxeno colocan os seus electróns na primeira capa, mentres que os elementos da segunda fila como o Li comezan a encher a segunda capa. Do mesmo xeito, o número de columna na que se atopa un elemento proporciona información sobre o seu número de electróns de valencia e polo tanto da súa reactividade. En xeral, o número de electróns de valencia é o mesmo dentro dunha columna e aumenta de esquerda a dereita dentro dunha fila. Os elementos do grupo 1 teñen só un electrón de valencia e os elementos do grupo 18 teñen oito, excepto o helio, que ten só dous electróns en total. Por tanto, o número de grupo é un bo predictor da reactividade de cada elemento. En resumo, as columnas da táboa periódica reflicten o número de electróns atopados na capa de valencia de cada elemento, que á súa vez determina como reaccionará o elemento.

O desenvolvemento da mecánica cuántica posterior a Bohr, aínda que é a utilizada a día de hoxe, non proporcionou ningunha explicación cualitativa mellorada da táboa periódica.

Durante os meus estudos de doutoramento a miña relación coa táboa periódica limitouse aos seus dous primeiros períodos polos motivos que describirei neste parágrafo. Mentres que a química orgánica e a inorgánica inicialmente se diferenciaron precisamente por que elementos da táboa periódica estudaban, desde o punto de vista da química/teórica computacional non existen tales distincións/preferencias, dado que todos os elementos están formados polas mesmas partículas. Con todo, a ecuación de Schrödinger, sen incluír outros efectos como poden ser os relativistas, non proporciona enerxías precisas para todos os elementos do sistema periódico. De feito, só é o suficientemente precisa para os compostos que conteñen elementos dos primeiros períodos.

Cualitativamente falando, os átomos máis pesados posúen electróns que se aceleran moito mais que os lixeiros e cuxas velocidades son mais próximas á velocidade da luz, e para os cales os efectos relativistas son por tanto maiores. Os efectos relativistas son responsables por exemplo da nobreza, trivalencia, e cor amarela dourada do ouro.³ Outro exemplo é a estrutura cristalina do mercurio.⁴ Un terceiro exemplo é a batería de chumbo e ácido. Dos seus 2.1 voltios por cela, máis de 1.7 voltios proveñen de efectos relativistas.⁵ Sen os efectos relativistas, por exemplo, os automóviles non arrincarían.

Na actualidade existen outros puntos de encontro entre a miña investigación e Mendeleev e a súa táboa periódica. Especificamente, moitos dos obxectos matemáticos que utilizo no día a día conteñen información dos elementos que constitúen as moléculas que estudo, da mesma maneira que fai a táboa periódica. E non só iso, dáse a circunstancia de que os meus obxectos matemáticos comparten polo menos tres pezas de información cruce dos elementos como veremos a continuación: os números atómicos, as valencias e os radios atómicos.

3.1. TEORÍA DE GRAFOS E TÁBOA PERIÓDICA

A continuación comentarei as similitudes que existen entre a táboa periódica e uns obxectos matemáticos (concretamente matrices), que son utilizados por algúns químicos teóricos como eu. As propiedades contidas tanto en táboas periódicas como nestas matrices que describirei a continuación son o número atómico, a valencia e os radios covalentes dos elementos químicos.

Así como a táboa periódica supuxo un avance teórico importante no desenvolvemento da química como indico mais arriba, hoxe en día moitos estudosos da química seguen desenvolvéndoa usando ferramentas provenientes das matemáticas e a estatística. Mais abaixo falaremos das ferramentas provenientes da estatística e do seu máximo expoñente hoxe en día, o “*machine learning*”. Neste apartado comentarei como usamos algún de nos a información contida na táboa periódica para o estudo da reactividade química.

A liña de investigación que levo a cabo nestes últimos 5 anos céntrase no desenvolvemento de modelos teóricos e programas informáticos para achegar a química computacional ao químico sen experiencia en cálculos e con interese en reactividade química, e tamén para o seu uso na docencia. Estes modelos baséanse en técnicas ou teorías da física clásica, como pode ser a dinámica molecular, e algoritmos matemáticos cuxo fin último é predicir a reactividade dun sistema nunhas condicións semellantes ás do laboratorio. A súa utilidade é obvia, dado que calquera químico experimental podería usalas como paso previo ao laboratorio para abaratar custos e mellorar a eficiencia/eficacia da parte experimental.

Unha parte esencial destas técnicas consiste en atopar descritores moleculares que permitan traducir o que sae do computador, que non son mais que listas de números que representan as coordenadas cartesianas de cada átomo, a una identidade molecular cunhas ligazóns determinadas e unha configuración espacial determinada. Isto non é tan sinxelo como parece porque estas coordenadas saen das dinámicas moleculares, e polo tanto as moléculas atópanse en moitas ocasións, altamente distorsionadas. Ademais, utilízanse para identificar eventos reactivos (situacións nas que as ligazóns químicas rompen ou forman) e as estruturas máis importantes en calquera reacción que se chaman estados de transición.

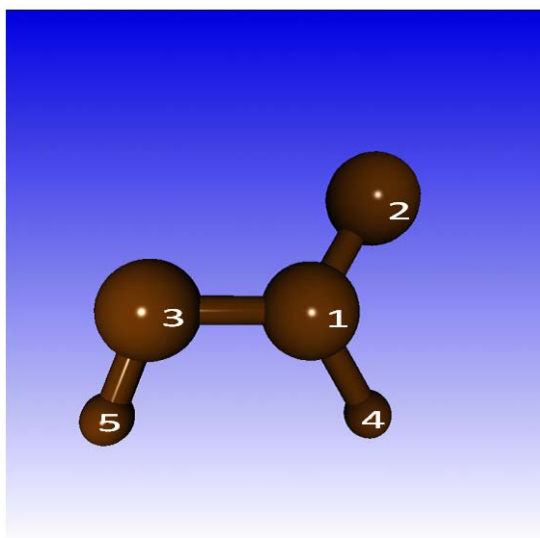


Figura 1. Grafo formado por cinco nodos unidos por catro vértices: $\{1:2\}, \{1:4\}, \{1:3\}$ e $\{3:5\}$

A rama das matemáticas que emprego para estes labores, se denomina teoría de grafos. Os grafos son obxectos formados por vértices unindo varios nodos, como se mostra na figura 1.

No grafo da figura 1 obsérvase que hai cinco nodos conectados por catro vértices. Os grafos pódense aplicar en numerosas e diversas disciplinas que van desde o debuxo computacional, enxeñería, redes de transporte, informática, ciencias sociais, etc.

Neste caso concreto, a elección do grafo da figura 1 foi feita para visualizar o feito de que os grafos pódense aplicar directamente tamén para representar moléculas onde os nodos serían os átomos e os vértices as ligazóns.

Podemos definir para estes grafos unha matriz (simétrica) de conectividade ou adxacencia que nos indica os vértices existentes entre os nodos, de forma que cada elemento da mesma a_{ij} é 1 cando existe un vértice entre os nodos i e j , e 0 cando non o hai. A correspondente matriz \mathbf{A} para o grafo da Figura 1 por tanto sería:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

A primeira conexión coa táboa periódica e as nosas matrices comeza aquí, dado que para a construción de \mathbf{A} precisamos dos radios atómicos (covalentes), cuxa periodicidade explica tamén a táboa periódica. Os elementos da matriz a_{ij} son funcións de Heaviside para cuxo cálculo necesitamos coñecer ademais das distancias entre cada par de átomos r_{ij} , os radios covalentes dos mesmos r_i :

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } \frac{r_{ij}}{r_i + r_j} < 1 \\ 0 & \text{si } \frac{r_{ij}}{r_i + r_j} \geq 1 \end{cases}$$

As matrices \mathbf{A} teñen o inconveniente de que non son invariantes respecto á permutación de nodos, é dicir, se intercambiamos os nodos (átomos) 4 e 5, a matriz cambia:

$$\mathbf{A}' = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Isto indica que \mathbf{A} non é un bo descriptor para usar en química, dado que se eu cambio simplemente a etiqueta de dous átomos (nodos) como o 4 e 5, a matriz cambia, aínda cando a identidade da molécula (grafo) sexa a mesma (seguimos tendo os mesmos ligazóns ou vértices). Por tanto, un descriptor mellor que a propia matriz son os seus valores propios, dado que estes si que son invariantes respecto as permutacións de nodos. Os valores propios das matrices de arriba (\mathbf{A} e \mathbf{A}') serían: [-1.848,-0.765,0,0.765,1.848].

Con todo, como sabemos, as moléculas están formadas por átomos de varios elementos químicos. Esa identidade necesita codificarse en \mathbf{A} polo motivo que explicarei a continuación. E para iso usamos o mesmo descriptor que na táboa periódica, os seus números atómicos. Se introducimos

a identidade nos nodos nun grafo como o da figura 1, poderemos convertelo nunha molécula real como é o ácido fórmico da figura 2.

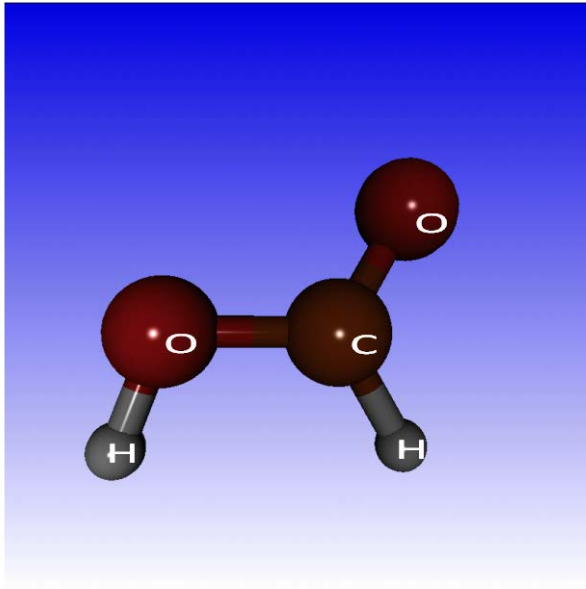


Figura 2. O mesmo grafo mostrado na figura 1 pero neste caso dándolle aos nodos a identidade de elementos químicos $\{C,O,O,H,H\}$ e aos vértices a identidade de ligazóns, dando lugar á molécula de ácido fórmico. Na teoría de grafos os vértices pódense definir con pesos e por tanto ligazóns dobres e triplas poderían ser explicitamente incluídos. Con todo, na análise que aquí faremos todas as ligazóns teñen un peso de 1.

A maneira de introducir os números atómicos de cada átomo da moléculas é poñéndoos na diagonal que anteriormente estaba valeira. Así, as matrices de adxacencia que inclúen os valores do número atómico para a molécula da Figura 2 e para a mesma intercambiando os hidróxenos, e que chamaremos \mathbf{A}_Z e $\mathbf{A}_{Z'}$, serán:

$$\mathbf{A}_Z = \begin{pmatrix} 6 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 8 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{A}_{Z'} = \begin{pmatrix} 6 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 8 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Neste caso os valores propios de ambas matrices serían: $[0.786, 0.867, 5.467, 8.066, 8.814]$. Isto ten sentido dado que se intercambiamos as posicións de dous hidróxenos, a identidade molecular non varía, mentres que se intercambiamos as posicións dos dous primeiros átomos (un C por un O, o que daría lugar a unha estrutura pouco verosímil pero válida para o exemplo), a matriz $\mathbf{A}_{Z'}$ sería:

$$\mathbf{A}_Z' = \begin{pmatrix} 6 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 8 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 8 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

E os seus correspondentes valores propios: [0.835,0.875,5.562,7.443,9.284], que son diferentes aos anteriores o cal fan das matrices que incorporan o número atómico uns bos descritores moleculares.

Outro descritor válido para o noso traballo é a valencia de cada elemento cuxa información se atopa así mesmo incluída na táboa periódica e que en teoría de grafos chámase o grao de cada nodo. De feito existe outra matriz en teoría de grafos que se denomina laplaciana e que contén a valencia (ou grao) de cada átomo (ou nodo) nas súas diagonais.

Por tanto, estas matrices de adxacencia modificadas e as laplacianas semellan táboas periódicas para moléculas dado que conteñen información relevante (para a reactividade e identidade) das mesmas. Fóra da diagonal as matrices conteñen información de conectividades atómicas para o que precisan dos radios atómicos, e na diagonal inclúen números atómicos e valencias, información tamén contida na táboa periódica.

A valencia tamén se pode usar en estudos computacionais da reactividade cunha perspectiva heurística baseada no coñecemento químico, usando o mesmo enfoque que para a construción da táboa periódica no seu momento. Basicamente aquí trataríase de ir buscando todas as reaccións químicas posibles do noso sistema químico, vendo en cada paso do noso mecanismo que ligazóns se poden romper e formar. Dado que estas combinacións darían lugar a un número enorme a medida que o sistema ten un tamaño mais grande, necesitamos acoutar a nosa mostraxe, o cal se pode facer centrándonos na zona onde sabemos que vai haber reacción (que se determina a partir de experiencia previa) e tamén acoutando os posibles graos (ou valencias) que pode ter cada átomo do sistema.

Por exemplo, para o ácido fórmico da figura 2 temos un total de 202 combinacións posibles (reaccións químicas) de ligazóns que se rompen ou forman tomando un máximo de tres roturas/formación por combinación. Usando como base heurística as valencias máximas dos átomos e algunha restrición máis, o número total de combinacións queda en 11. Isto demostra o poder das aproximacións heurísticas baseadas no coñecemento químico para os estudos computacionais.

Consecuentemente, tanto o número atómico como a valencia e o radio atómico, todos eles descritores empregados para configurar a táboa periódica, son tamén descritores empregados na construción de matrices relevantes no estudo computacional automatizado da reactividade química.

3.2. MACHINE LEARNING E TÁBOA PERIÓDICA

Un dos campos nos que comecei a traballar ultimamente é no uso de “*Machine Learning*” (ML) en cinética química computacional. Os cálculos cinetico-computacionais requiren a resolución da ecuación de Schrödinger para un gran número de estruturas (e particularmente estados de transición que son moito máis difíciles de optimizar) polo que estes cálculos mecánico cuánticos convertéronse no pescozo de botella da química computacional. Isto limita o estudo de sistemas grandes e realistas (por exemplo o estudio en disolución incluíndo moléculas de disolvente de forma explícita).

Unha alternativa aos custosos cálculos mecano cuánticos é o *ML*, que se ocupa do descubrimento de patróns en datos usando algoritmos baseados na estatística na maior parte dos casos. Eses patróns poden ser usados posteriormente para clasificación de datos ou para facer predicións.

Diversas técnicas de *ML* se teñen usado con éxito en varias disciplinas relacionadas coa química, como poden ser o desenvolvemento de superficies de enerxía potencial (*SEPs*), e mesmo para planificar a síntese de moléculas orgánicas.⁶

O meu interese céntrase na predición das enerxías de activación das reaccións químicas, o que da a probabilidade de que o proceso ocorra. Estas enerxías pódense predicir de forma rigorosa se fósomos quen de adestrar o noso modelo de *ML* cun bo conxunto de datos *ab initio* ou experimentais.⁷ Aparte dos datos, unha das claves é escoller axeitadamente as características ou descritores moleculares que usamos para alimentar ou adestrar o noso modelo de *ML*. Existen unha gran cantidade de descritores pero algúns válidos poden ser aqueles que tamén recolle a táboa periódica (e que xa se mencionaron arriba), como poden ser: os números atómicos dos átomos que conforman o sistema, a valencia de cada átomo, os seus radios atómicos, etc. Obviamente existen outros descritores que non están directamente relacionados coa táboa periódica pero que se basean nos mesmos principios heurísticos que conduciron á dedución da táboa periódica. Isto conformaría un modelo de *ML* con sabor químico e que probablemente funcione mellor.

Unha das aplicacións de *ML* con sabor a táboa periódica é a representación de *SEPs* baseada en redes neuronais (que é un modelo de *ML*) de Behler e Parrinello.⁸ Estes dous autores aproximan a enerxía do noso sistema químico como unha suma de contribucións atómicas. Cada átomo do sistema descríbese por un conxunto de funcións simétricas, que serven de entrada a unha rede neuronal dese elemento. Desta maneira, cada elemento da táboa periódica caracterízase por unha rede neuronal diferente.

Con todo, as redes neuronais de Behler e Parrinello usan como datos de entrada as xeometrías de cada átomo que conforma a molécula. Existen redes neuronais con mais sabor químico e cuxo *input* inclúe os números atómicos de cada elemento, e que son quen de predicir propiedades atómicas e moleculares con erros comparables a cálculos *DFT* sendo infinitamente máis rápidas desde o punto de vista computacional.

Unha última e sorprendente conexión entre *ML* e táboa periódica son redes neuronais que poden aprender da estrutura interna e da información química da táboa periódica. Estas redes aprenden a estrutura bidimensional da táboa periódica como información química relevante.⁹

3.3. TÁBOAS PERIÓDICAS INTERACTIVAS/ MULTIDIMENSIONAIS

Como curiosidade final gustaríame comentar aquí a existencia de táboas periódicas denominadas multidimensionais e/ou interactivas dado que posúen varias capas de información que dificilmente podería ser plasmada nas tradicionais de dúas dimensións. Pola súa característica multidimensional son evidentemente táboas en formatos electrónicos (*html* en xeral) e tamén interactivas.

Moitas das táboas periódicas que vemos en dúas dimensións non mostran moita información que podería ser de utilidade tanto para a docencia como para a investigación. Con táboas periódicas multidimensionais refírome a aquelas que son xeradas mediante distintas linguaxes de programación de maneira que ao facer click ou ao pasar o rato sobre cada un dos elementos das mesmas abren xanelas adicionais (de aí a multidimensionalidade) mostrando esa información extra

Un exemplo é a seguinte táboa xerada coa librería Bokeh de Python e que vimos este ano nun curso de formación de profesorado universitario sobre competencias informáticas en química. O código Python foi sacado dos exemplos que existen na documentación da librería Bokeh.¹⁰

Periodic Table (omitting LA and AC Series)

1																		2																	
1	H 1.00794 Hydrogen																	2	He 4.002602 Helium																
3	Li 6.941 Lithium	4	Be 9.012182 Beryllium											5	B 10.811 Boron	6	C 12.01107 Carbon	7	N 14.0067 Nitrogen	8	O 15.9994 Oxygen	9	F 18.9984032 Fluorine	10	Ne 20.1797 Neon										
11	Na 22.98976928 Sodium	12	Mg 24.304 Magnesium											13	Al 26.9815386 Aluminum	14	Si 28.0855 Silicon	15	P 30.973762 Phosphorus	16	S 32.065 Sulfur	17	Cl 35.453 Chlorine	18	Ar 39.948 Argon										
19	K 39.0983 Potassium	20	Ca 40.078 Calcium	21	Sc 44.955912 Scandium	22	Ti 47.887 Titanium	23	V 50.9415 Vanadium	24	Cr 51.9961 Chromium	25	Mn 54.938045 Manganese	26	Fe 55.845 Iron	27	Co 58.933195 Cobalt	28	Ni 58.6934 Nickel	29	Cu 63.546 Copper	30	Zn 65.38 Zinc	31	Ga 69.723 Gallium	32	Ge 72.64 Germanium	33	As 74.92160 Arsenic	34	Se 78.96 Selenium	35	Br 79.904 Bromine	36	Kr 83.796 Krypton
37	Rb 85.4678 Rubidium	38	Sr 87.62 Strontium	39	Y 88.90585 Yttrium	40	Zr 91.224 Zirconium	41	Nb 92.90638 Niobium	42	Mo 95.94 Molybdenum	43	Tc 98 Technetium	44	Ru 101.07 Ruthenium	45	Rh 102.90550 Rhodium	46	Pd 106.42 Palladium	47	Ag 107.8682 Silver	48	Cd 112.411 Cadmium	49	In 114.818 Indium	50	Sn 117.710 Tin	51	Sb 121.760 Antimony	52	Te 127.60 Tellurium	53	I 126.90447 Iodine	54	Xe 131.293 Xenon
55	Cs 132.9054519 Cesium	56	Ba 137.327 Barium	LA	72	Hf 178.49 Hafnium	73	Ta 180.94788 Tantalum	74	W 183.84 Tungsten	75	Re 186.207 Rhenium	76	Os 193.22 Osmium	77	Ir 192.217 Iridium	78	Pt 195.084 Platinum	79	Au 196.966569 Gold	80	Hg 200.59 Mercury	81	Tl 204.3833 Thallium	82	Pb 207.2 Lead	83	Bi 208.9804 Bismuth	84	Po 209 Polonium	85	At 210 Astatine	86	Rn 222 Radon	
87	Fr 223 Francium	88	Ra 226 Radium	AC	104	Rf 261 Rutherfordium	105	Dub 262 Dubnium	106	Sg 263 Seaborgium	107	Bh 264 Bohrium	108	Hs 265 Hassium	109	Mt 266 Meitnerium	110	Ds 271 Darmstadtium	111	Rg 272 Roentgenium	112	Cn 285 Copernicium	113	Nh 284 Nihonium	114	Fl 289 Flerovium	115	Mc 288 Moscovium	116	Lv 293 Livermorium	117	Ts 294 Tennessine	118	Og 294 Oganesson	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18																		

Figura 3. Táboa periódica interactiva/multidimensional xerada coa librería bokeh de Python e tomada dos exemplos da propia librería.¹⁰

Evidentemente a táboa periódica da figura non é multidimensional nin interactiva, dado que se gardou como arquivo con formato *png* para que apareza neste capítulo. Con todo, o código orixinal que se pode obter dos exemplos da propia librería abre o navegador predeterminado en cada computador e funciona con arquivos *html*.

Existen ademais táboas periódicas interactivas *online* con información sobre campos de forzas, parametrizacións semiempíricas e conxuntos de bases para cálculos *ab initio* desenvolvidos para cada un dos elementos da táboa periódica.¹¹

Tamén existen outros servidores *online* que permiten facer reaccións químicas cos elementos dunha táboa periódica interactiva de forma moi didáctica.¹² <https://www.msichicago.org/play/goreact/>

4. REFERENCIAS

- Carbo-Dorca, R.; Chackaborty, T., *J. Comput. Chem.* **2019**, *40*, 2653.
- Pyykko, P., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, *13*, 161.
- Schwerdtfeger, P., *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, *111*, 7261.
- Moriarty, J. A., *Phys. Lett. A* **1988**, *131*, 41.
- Ahuja, R.; Blomqvist, A.; Larsson, P.; Pyykko, P.; Zaleski-Ejgierd, P., *Phys. Rev. Lett.* **2011**, *106*, 018301.
- Segler, M. H. S.; Preuss, M.; Waller, P., *Nature* **2018**, *555*, 604.
- <https://www.chemie.uni-bonn.de/pctc/mulliken-center/software/GMTKN/gmtkn55>.
- Behler, J.; Parrinello, M., *Phys. Rev. Lett.* **2007**, *98*, 146401.

9. Z., X.; Zhenga, P.; Zhang, R.-Z., *Chem. Sci.* **2018**, 9, 8426.

10. <https://docs.bokeh.org/en/latest/docs/gallery/periodic.html>.

11. <http://www.chamotlabs.com/Freebies/Table/parameters-table.html>.

12. <https://www.msichicago.org/play/goreact/>.