

COMPUQUÍMICA

PROGRAMA DE CÓMPUTO PARA EL CÁLCULO DE SUSCEPTIBILIDADES MAGNÉTICAS MOLARES Y MOMENTOS MAGNÉTICOS EFECTIVOS EN COMPUESTOS DE COORDINACIÓN

Ma. de Lourdes Juárez H, Luis Alejandro Corno J., y Rodolfo Acevedo Chávez*

La computación aplicada a la química. Una sección de intercambio de programas entre los lectores

Como parte de la caracterización magnética preliminar de un compuesto de coordinación, se encuentra la determinación de su susceptibilidad magnética molar y del momento magnético efectivo a una temperatura dada, las más de las veces a temperatura ambiental. La determinación de dichos valores es una operación aritmética

tediosa, y un programa de cálculo permite superar dicho problema.

El programa que aquí se anuncia está construido en lenguaje GW BASIC, utiliza una base de datos sobre correcciones diamagnéticas molares de diversas especies químicas, y que permite también la inserción de correcciones diamagnéticas no consideradas en dicha base. El programa opera sobre la alimentación de los datos experimentales provenientes de la medición en una balanza de susceptibilidades

magnéticas, así como de la masa molar del compuesto y de las correcciones diamagnéticas correspondientes.

Este programa puede ser ejecutado en cualquier computadora personal que contenga lenguaje GW BASIC. El programa puede ser proporcionado bajo envío* de un disco flexible de 5 $\frac{1}{4}$ ".

*Centro de Química, ICUAP
Apdo. Postal 1613, Puebla, Puebla.
México.