

Revisión a : Relativistic Bohr Model with Finite-Mass Nucleus

Juliana González, William A. Romero R.

Departamento de Física
Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia

Resumen

Se presenta una revisión del artículo *Relativistic Bohr Model with Finite-Mass Nucleus* de James T. Cushing. Resaltando los conceptos físicos más importantes y presentando detalles adicionales en el desarrollo matemático presentado en el artículo original.

1. Introducción

Relativistic Bohr Model with Finite-Mass Nucleus de James T. Cushing. Es un artículo del año 1970 que presenta un estudio del modelo atómico de Bohr, con los respectivos ajustes como los son la masa finita del núcleo y el movimiento relativo del electrón. Con énfasis en las aproximaciones para obtener los niveles de energía dados por *Sommerfeld*, dentro del orden de α^2 y $\frac{m}{M}$.

Para este fin se realiza una revisión del marco teórico correspondiente del estudio presentado. Seguido y del mismo modo, se realiza el análisis y desarrollo para la deducción de los niveles de energía de Bohr. Finalmente se presentan las conclusiones de la revisión del artículo inicial y del análisis adicional dado.

2. Marco teórico

En primera instancia se presenta una breve descripción de los conceptos teóricos esenciales para el planteamiento del problema. Partiendo del modelo simple de Bohr, adicionando las correcciones realizadas posteriormente a éste.

2.1. Modelo de Bohr

El modelo de átomo de Bohr considera que los electrones giran alrededor del núcleo describiendo una órbita circular. Esta consideración establece la siguiente relación mecánica entre la fuerza de Coulomb y fuerza centripeta:

$$F_{Coulomb} = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \hat{r}$$
$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r} \quad (1)$$

donde Ze es la carga del núcleo (Z , número atómico; $Z = 1$ para H), e es la carga del electrón, r el radio de la órbita, m la masa y v la velocidad del electrón.

De igual manera postula que la cantidad de movimiento angular se encuentra cuantizado de tal manera que:

$$l = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar \quad (2)$$

Despejese la velocidad de la ecuación (2) para utilizarla en (1) y así deducir una expresión de la velocidad en términos de las cargas, n y \hbar . Multiplicando la ecuación por $\frac{1}{c}$, se tiene:

$$\frac{v}{c} = \frac{1}{n} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \quad (3)$$

Ahora de la segunda ley de *Newton* $F = -\nabla V$, se obtiene el potencial de *Coulomb*

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (4)$$

que se utilizará para encontrar la energía total del sistema: $E = T + V(r)$, con $T = \frac{1}{2}mv^2$. Si utilizamos la ecuación (3) en T y desarrollamos la expresión para la energía, entonces:

$$E_n = \frac{-Z^2 e^4 m}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2} \quad (5)$$

2.2. Corrección por masa finita del núcleo

Hasta el momento se consideró el núcleo de masa infinita y con posición fija. Pero en adelante se considera el núcleo de masa M . La masa reducida del sistema está dada por:

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \quad (6)$$

En consecuencia debe remplazarse m por μ en las ecuaciones planteadas antes de la corrección. Se define la constante de estructura fina α como:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \quad (7)$$

y haciendo la sustitución correspondiente en la ecuación de energía :

$$E_n = \frac{-Z^2 m c^2 \alpha^2}{2n^2}$$

$$E_n = \frac{-Z^2 \mu c^2 \alpha^2}{2n^2} \quad (8)$$

3. Planteamiento del problema

El núcleo y el electrón giran alrededor de su centro de masa, sea m, e, v_1 la masa, la carga y la velocidad del electrón respectivamente y M, e, v_2 la masa, la carga y la velocidad del núcleo, entonces se tiene la siguiente relación:

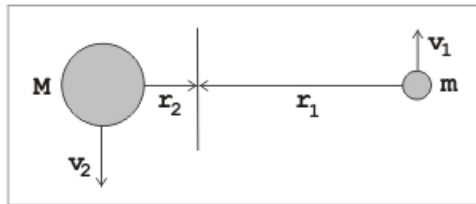


Figura 1: Sistema electrón - núcleo

$$\frac{mv_1^2}{r_1} = \frac{Mv_2^2}{r_2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r_1 + r_2)^2} \quad (9)$$

Al movimiento del electrón y el núcleo, se tiene el campo eléctrico y magnético asociado a cada uno. Si se suma la fuerza eléctrica y magnética que actúan sobre el electrón, es decir, la fuerza de *Lorentz*, ésta se encuentra en términos de los campos eléctrico y magnético del núcleo; y recíprocamente en el caso del núcleo. Lo que permite plantear:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = F = F_{Lorentz}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{mv_1}{\sqrt{1-\beta_1^2}} \right) &= q_1(E_2 + v_1 \times B_2) \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{mv_2}{\sqrt{1-\beta_2^2}} \right) &= q_2(E_1 + v_2 \times B_1) \end{aligned} \quad (10)$$

Teniendo en cuenta la corrección de masa relativista donde: $\beta_j = \frac{v_j}{c}$ para $j = 1, 2$. De lo anterior note que:

$$\begin{aligned} \beta_1 &\simeq \frac{\alpha}{n} \\ \beta_2 &\simeq \frac{\beta_1 m}{M} \simeq \frac{m \alpha}{M n} \\ \beta_1 \beta_2 &\simeq \frac{m \alpha^2}{M n^2} \end{aligned} \quad (11)$$

Dadas las condiciones electrodinámicas del sistemas, el artículo original provee una aproximación del orden de β^2 para E y B , en términos de las variables conocidas hasta el momento: e, r, v, c . Siendo:

$$s = r - \frac{vr}{c}$$

Se propone:

$$\frac{4\pi\epsilon_0}{e} E = \frac{1}{s^3} \left(r - \frac{rv}{c} \right) (1 - \beta^2) + \frac{1}{c^2 s^3} \left(r \times \left(r - \frac{rv}{c} \right) \times \dot{v} \right) \quad (12)$$

$$B = \frac{r \times E}{rc} \quad (13)$$

Con el objetivo de reescribir las ecuaciones (10) y así obtener la ecuación dinámica del sistema del orden de α^2 y $\frac{m}{M}$. Que es:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\mu v}{\sqrt{1-\beta^2}} \right) = F = -\frac{k}{r^2} \hat{r} \quad (14)$$

para $k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$

4. Niveles de energía de Bohr

4.1. Conceptos preliminares

Para el análisis de los niveles de energía deben entenderse las reglas de cuantización planteadas por *Sommerfeld-Wilson*, las cuales son:

- Para todo sistema físico en el cual sus coordenadas sean funciones dependientes del tiempo, entonces existe una condición cuántica para cada una de las coordenadas que componen el sistema.

$$\oint p_q dq = n_q h \quad (15)$$

Donde q es una de las coordenadas, p_q es el momento asociado con dicha coordenada y n_q es el número cuántico, el cual sólo toma valores enteros.

- Las orbitas permitidas son únicamente aquellas en las cuales la circunferencia de la orbita puede contener exactamente un número entero de longitudes de onda de *De Broglie*.

También es de importancia, la corrección relativista que se realiza sobre el momento lineal:

$$\vec{p} = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (16)$$

Nótese que cuando v es muy pequeña en comparación con c se observa el comportamiento clásico. Para completar los aspectos preliminares, vale la pena recordar:

- La definición de momento angular, utilizando la ecuación del momento lineal relativista:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = r \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \sin(\theta) \quad (17)$$

- Potencial de *Coulomb*:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (18)$$

- La energía total del sistema:

$$E = T + V = \mu c^2 \left(\frac{-1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \right) + V(r) \quad (19)$$

4.2. Análisis y desarrollo

Utilizando la forma relativista de la segunda ley de *Newton*:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = F = -\nabla V \quad (20)$$

Para simplificar nuestro desarrollo, utilizaremos la sustitución:

$$\beta^2 = \frac{v^2}{c^2} \quad (21)$$

$$\vec{p} = \frac{\mu \dot{r}}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (22)$$

Descomponiendo la velocidad en sus componentes radial y tangencial se tiene:

$$\beta = \frac{\dot{r}\hat{r} + r\dot{\theta}\hat{\theta}}{c} = \frac{\dot{r}}{c} \quad (23)$$

La simetría del problema permite la utilización de coordenadas polares (r, θ) con el propósito de simplificar los cálculos a seguir. Para este caso, el momento angular como la energía total son constantes respecto al tiempo. En consecuencia:

$$\frac{d\vec{l}}{dt} = 0 \quad (24)$$

$$l = r \times p \quad (25)$$

$$\frac{dE}{dt} = 0 \quad (26)$$

De la ecuación (20), se deduce la componente radial:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\mu \dot{r}}{\sqrt{1-\beta^2}} \right) = \frac{k}{r^2} + \frac{\mu r \dot{\theta}^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (27)$$

y la componente tangencial, la cual representa la magnitud del momento angular:

$$l = \frac{\mu r^2 \dot{\theta}}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (28)$$

Utilizando la siguiente sustitución, que es inversamente a $\frac{1}{r}$ como lo es el potencial de *Coulomb*, puede escribirse éste en términos de u :

$$u(\theta) = \frac{1}{r(\theta)} \quad (29)$$

En combinación de las ecuaciones (19) y (29) se llega a la ecuación de orbita de una elipse:

$$\frac{d^2 u}{d\theta^2} + \gamma^2 u = \gamma^2 a \quad (30)$$

cuya solución general es:

$$u(\theta) = A \cos(\gamma\theta) + B \sin(\gamma\theta) + a \quad (31)$$

Nótese que la condición de frontera más apropiada es: $\frac{du}{d\theta} = 0$ para $\theta = 0$. Solucionando la ecuación con la condición mencionada, se obtiene:

$$u(\theta) = a + b \cos(\gamma\theta) \quad (32)$$

Utilizando nuevamente la ecuación inmediatamente anterior y la ecuación para la energía, se llega a la siguiente relación:

$$b^2 = a^2 + \frac{\mu E}{l\gamma^2} \times \left(2 + \frac{E}{\mu c^2} \right) \quad (33)$$

Recordando las condiciones de cuantización, el momento angular se cuantiza (postulación que Bohr realizó en su modelo original)

$$l = n_\theta \hbar \quad (34)$$

y

$$P_r = -l\gamma b \sin(\gamma\theta) \quad (35)$$

Como la integración se realiza sobre un periodo de tiempo, entonces para que r y p_r vuelvan a los valores que tenían en $\theta = 0$, el límite de integración superior debe ser $\theta = \frac{2\pi}{\gamma}$. Así se obtiene:

$$\oint p_r dr = l \int_0^{\frac{2\pi}{\gamma}} \left(\frac{du}{d\theta} \right)^2 \frac{1}{u^2} d\theta = l b^2 \alpha^2 \int_0^{\frac{2\pi}{\gamma}} \frac{\sin^2(\gamma\theta)}{(a + b \cos(\gamma\theta))^2} d\theta \quad (36)$$

$$= l \zeta^2 \gamma^2 \int_0^{2\pi} \frac{\sin^2(x)}{(1 + \zeta \cos(x))^2} dx = n_r h_r$$

$$\zeta^2 = \frac{b^2}{a^2} = 1 + \frac{El^2 \gamma^2 \left(2 + \frac{El^2(1-\gamma^2)}{\mu k^2} \right)}{\mu k^2 \left(1 + \frac{El^2(1-\gamma^2)}{\mu k^2} \right)}$$

(37)

El resultado de la integral es:

$$\frac{2\pi}{\zeta^2} \left(\frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}} - 1 \right) \quad (38)$$

del resultado de la ecuación (36) se llega a una de las conclusiones más importantes del artículo:

$$\frac{n_r}{n_\theta} = \gamma \times \left(\frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}} \right) \quad (39)$$

Lo que significa que las formas de las orbitas dependen de la relación que hay entre el **número cuántico principal** y el **número cuántico azimutal**. El número cuantico principal se define como $n_\theta + n_r$. Para el caso en el cual n es igual a n se obtiene órbitas circulares de radio a las cuales cumplen con los postulados de *Bohr*. De las últimas tres ecuaciones finalmente se llega a una ecuación cuadrática para las energías permitidas en el modelo de *Bohr*. Sin embargo, hay que tener en cuenta que todo lo que se ha desarrollado hasta ahora es válido únicamente para α de orden 2 y $\frac{m}{M}$.

Así los niveles de energía permitidos para el modelo de *Bohr* con las respectivas correcciones relativistas realizadas por *Sommerfeld* estan dados por:

$$E_n = \frac{-Z^2 m c^2 \alpha^2}{2n^2} \times \left\{ 1 + \left(\frac{\alpha^2 Z^2}{n} \right) \left(n_\theta^{-1} - \frac{3}{4n} \right) \right\} \quad (40)$$

$$E_n = \frac{-Z^2 \mu c^2 \alpha^2}{2n^2} \times \left\{ 1 + \left(\frac{\alpha^2 Z^2}{n} \right) \left(n_\theta^{-1} - \frac{3}{4n} \right) \right\} \quad (41)$$

5. Conclusiones

De la relación que se encontró entre el número cuántico principal y el número cuántico azimutal se puede observar que para $n = 1$ y $n_\theta = 1$ se obtiene una órbita circular. Para todo el resto de valores que puedan tomar estos números las orbitas serán elípticas.

Se puede dar el caso de que para un mismo número cuántico principal existan diferentes números cuánticos azimutales; este hecho se conoce como *degeneramiento orbital*. Un ejemplo de este fenómeno se da en el movimiento planetario, donde la fuerza gravitacional es proporcional a $\frac{1}{r^2}$. Lo que *Sommerfeld* trato de hacer con la corrección relativista al modelo atómico de *Bohr*, fue tratar de eliminar ese fenómeno de degeneramiento, ya que aunque en los casos macroscópicos la física no se ve alterada, a nivel microscópico este fenómeno no se puede presentar debido a la cuantización de los parámetros de las órbitas.

La corrección de *Sommerfeld* fue del orden 10^{-4} que fue justamente la magnitud de los desdoblamientos que se presentaban en el espectro del hidrogeno y los cuales se requerían para poder explicar la estructura fina del mismo, que en últimas era el principal propósito de *Sommerfeld* cuando comenzó con su investigación.

Referencias

- [1] J.T. Cushing *Relativistic Bohr Model with Finite-Mass Nucleus* Amer. J. Phys. 38, 9 (1970).
- [2] R. Eisberg y R. Resnick *Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei and particles*