



EL MODELO ATÓMICO DE BOHR: UNA APLICACIÓN

RAÚL GARCÍA LLAMAS

Se aplica la teoría atómica de Bohr cuyo centenario se celebra este 2013, utilizando la aproximación electrostática y un algoritmo numérico para resolver las ecuaciones clásicas de movimiento del núcleo y de los electrones en átomos complejos, con el fin de estudiar su dinámica. Se presentan resultados numéricos para el caso del átomo de Hidrógeno y el átomo de Helio.

RAÚL GARCÍA-LLAMAS
Universidad de Sonora, Departamento de Investigación en Física
Correo: ragal@cifus.uson.mx

*Autor para correspondencia: Raúl García Llamas
Correo electrónico: ragal@cifus.uson.mx
Recibido: 12 de marzo de 2013
Aceptado: 21 de mayo de 2013
ISSN: 2007-4530



INTRODUCCIÓN

Este año se celebra un siglo de la teoría atómica de Bohr, la cual representa la transición entre la mecánica clásica y la mecánica ondulatoria o cuántica. Finalmente la mecánica cuántica ganó la batalla y en la actualidad es la que se usa para tratar fenómenos a nivel atómico.

En 1913 el físico Niels Bohr (1) planteó los postulados que hoy llevan su nombre y que le permitieron proponer un esquema semiclásico, para explicar los espectros de emisión y absorción del átomo de Hidrógeno y sentar las bases para comprender estos fenómenos en átomos complejos. Esta nueva teoría se basa, por un lado, en el trabajo de Planck (2), en el cual se establecía que el intercambio de energía entre la radiación y la materia se realiza de forma discreta, fenómeno que se conoce como la cuantización de la energía, así como en el de Rutherford (3), que estableció la estructura moderna del átomo con el experimento de difracción de partículas alfa por átomos de oro.

En este trabajo se aplica la teoría atómica de Bohr al problema de la interacción de dos electrones con un núcleo en la aproximación electrostática. Se resuelve numéricamente el problema de los tres cuerpos (4) usando la mecánica clásica y los postulados de Bohr, con el fin de buscar soluciones estables para garantizar la confiabilidad de los resultados encontrados.

Primero se establece un algoritmo numérico, basado en el movimiento con aceleración uniforme para tiempos ultracortos, para encontrar la solución al problema planteado y que satisfagan los postulados de Bohr, posteriormente se aplica dicho formalismo al problema de dos electrones interaccionando con un núcleo.

Enseguida se transcriben los postulados de Bohr (1) en su versión original en inglés:

That the dynamical equilibrium of the systems in the stationary states can be discussed by help of the ordinary mechanics, while the passing of the systems between different stationary states cannot be treated on that basis.

Que el equilibrio dinámico de los sistemas en estados estacionarios puede ser discutido con la ayuda de la mecánica ordinaria, mientras que el paso de los sistemas entre diferentes estados estacionarios no puede ser tratado mediante esta base.

That the latter process is followed by the emission of a homogeneous radiation, for which the relation between the frequency and the amount of energy emitted is the one given by Planck's theory.

Que el anterior proceso es seguido por la emisión de una radiación homogénea, para la cual la relación entre la frecuencia y la cantidad de energía emitida es aquella dada por la teoría de Planck.

The different stationary states correspond to the emission of a different number of Planck's energy-quanta and,

Los diferentes estados estacionarios corresponden a la emisión de diferentes números cuánticos de energía de

Planck y,

That the frequency of the radiation emitted during the passing of the system from a state in which no energy is yet radiated out to one of the stationary states, is equal to half the frequency of revolution of the electron in the latter state.

Que la frecuencia de la radiación emitida durante el paso del sistema de un estado en el cual no hay aún energía radiada a uno de los estados estacionarios, es igual a la mitad de la frecuencia de revolución del electrón en el último estado.

EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO Y EL ALGORITMO NUMÉRICO

Un electrón orbitando alrededor de un protón constituye un átomo de hidrógeno, el elemento más ligero y abundante del universo. Estas partículas están sujetas a fuerzas de tipo electromagnético y gravitacional, esta última se desprecia ya que su magnitud es pequeña comparada con la magnitud de la fuerza electromagnética.

Usando la segunda ley de Newton y considerando únicamente la fuerza de Lorentz, la ecuación del movimiento del protón es:

$$m_p \vec{a}_0(t) = +e \vec{E}_1[\vec{r}_0(t), t] + e \vec{v}_0(t) \times \vec{B}_1[\vec{r}_0(t), t] \quad (1)$$

Donde $\vec{a}_0(t)$, $\vec{v}_0(t)$, m_p y $+e$ son la aceleración, la velocidad, la masa y la carga del protón, respectivamente; $\vec{E}_1(\vec{r}_0, t)$ y $\vec{B}_1(\vec{r}_0, t)$ representan el campo eléctrico y magnético producido por el electrón en la posición del protón $\vec{r}_0(t)$. Mientras que, ecuación del movimiento del electrón está dada por:

$$m_e \vec{a}_1(t) = -e \vec{E}_0[\vec{r}_1(t), t] - e \vec{v}_1(t) \times \vec{B}_0[\vec{r}_1(t), t] \quad (2)$$

Donde $\vec{a}_1(t)$, $\vec{v}_1(t)$, m_e y $-e$ son la aceleración, la velocidad, la masa y la carga del electrón, respectivamente; $\vec{E}_0(\vec{r}_1, t)$ y $\vec{B}_0(\vec{r}_1, t)$ representan el campo eléctrico y magnético producido por el núcleo en la posición del electrón $\vec{r}_1(t)$.

Los campos electromagnéticos producidos por cargas en movimiento son matemáticamente complicados y más adelante se harán algunas simplificaciones para resolver (1) y (2).

Para encontrar una solución numérica a este problema se debe establecer las condiciones iniciales. Las posiciones y velocidades iniciales del núcleo y del electrón son:

$$\vec{r}_0(0) = -fd_1 \hat{i}, \quad \vec{r}_1(0) = +d_1 \hat{i}, \quad \vec{v}_0(0) = -fv_1 \hat{j}, \quad \vec{v}_1(0) = +v_1 \hat{j} \quad (3)$$

Donde $f = m_e/m_p \approx 1/1836$. Con esta selección de posiciones y velocidades, el centro de masa, que es el punto donde se supone concentrada toda la masa del sistema, y la velocidad del centro de masa son cero.

El momento angular total es $\vec{L} = \vec{r}_0(0) \times m_p \vec{v}_0(0) + \vec{r}_1(0) \times m_e \vec{v}_1(0)$, así el postulado de Bohr, se refiere a la versión moderna del postulado 4, la magnitud del momento angular total es un múltiplo entero de la constante de Planck dividida entre dos π , es:

$$(1 + f)d_1 m_e v_1 = n\hbar \quad (4)$$

Donde n es un número entero positivo y \hbar es la llamada constante de Planck dividida entre dos π . Esta relación establece la cuantización de la posición. Una vez que se conoce la velocidad, la posición solo puede tomar ciertos valores discretos de acuerdo a la ecuación 4.

LA APROXIMACIÓN ELECTROSTÁTICA

En esta sección asumimos que el campo eléctrico se puede calcular usando el campo electrostático o Coulombiano y despreciamos el campo magnético. Este aproximación se aplica en átomos ligeros, donde las velocidades esperadas de los electrones son mucho menores que la velocidad de la luz. De las ecuaciones 1 y 2 calculamos la aceleración inicial del electrón y del protón:

$$\vec{a}_1(0) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e} \frac{\vec{r}_1(0) - \vec{r}_0(0)}{|\vec{r}_1(0) - \vec{r}_0(0)|^3} = -a_e \hat{i} \quad (5)$$

$$\vec{a}_0(0) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_p} \frac{\vec{r}_0(0) - \vec{r}_1(0)}{|\vec{r}_0(0) - \vec{r}_1(0)|^3} = +f a_e \hat{i} \quad (6)$$

Donde ϵ_0 es la constante dieléctrica del vacío y $a_e = e^2/4\pi\epsilon_0 m_e d_1^2 (1 + f)^2$. Hay que recordar que el campo eléctrico Coulombiano es proporcional al producto de las cargas e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia que separa las partículas, su forma matemática es:

$$\vec{E}_1(t) = -\frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}_1(t) - \vec{r}_0(t)}{|\vec{r}_1(t) - \vec{r}_0(t)|^3}$$

EL ALGORITMO NUMÉRICO

Una vez que se tiene la aceleración al tiempo inicial $t_0 = 0$, se puede calcular las velocidades y las posiciones del electrón y del núcleo al tiempo $t_1 = \Delta t$, suponiendo un movimiento con aceleración uniforme y así sucesivamente. En un movimiento con aceleración uniforme la posición y la velocidad de la partícula están dadas por $x(t) = x_0 + v_{x0}t + 0.5a_x t^2$ y $v_x(t) = v_{x0} + a_x t$, y similarmente para la componente y. Si suponemos que esto se cumple para tiempos muy pequeño, entonces es posible usar estas ecuaciones para conocer las posiciones y las velocidades de las partículas involucradas a un tiempo posterior para así calcular las nuevas aceleraciones dadas por las ecuaciones 5 y 6.

Si la órbita es estable, es decir, si ante una pequeña perturbación energética la órbita es casi la misma,

entonces decimos que la órbita es estable, y si se satisface la ecuación 4 entonces se clasifica como una de las órbitas de Bohr.

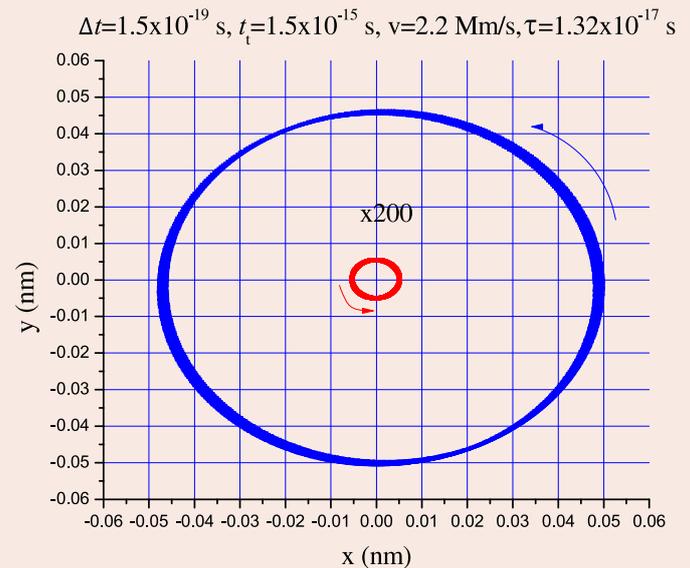


Figura 1. Trayectorias calculadas para el núcleo (color rojo), la cual ha sido aumentada 200 veces, y para el electrón (color azul). Las flechas indican la dirección del movimiento.

De la figura 1 contando los puntos para completar una vuelta y teniendo el intervalo temporal para el cálculo de éstos, se obtuvo el periodo de oscilación $\tau = 1.32 \times 10^{-17}$ s y por tanto la frecuencia, el recíproco del periodo, es $\nu = 7.5 \times 10^{16}$ Hz.

Para el caso del átomo de Hidrógeno se puede demostrar que el cuasi-electrón, la pseudo-partícula que aparece al cambiar a las coordenadas del dentro de masa, satisface $r^2 \dot{\phi} = cte$, donde r y $\dot{\phi}$ son la magnitud de la posición y la velocidad angular del cuasi-electrón, respectivamente. Esto significa que el momento angular se conserva. Este resultado establece una ecuación para la magnitud r , la cual es resuelta en los libros de mecánica clásica (4). Este caso sirvió para probar el algoritmo numérico. En este problema se establece que las trayectorias pueden ser circulares, elípticas, etcétera. En el caso numérico que tratamos en esta sección, buscamos las condiciones numéricas para obtener trayectorias circulares y que sirviera como punto de partida en el siguiente caso: El átomo de Helio. En la siguiente sección analizaremos el átomo de Helio.

EL ÁTOMO DE HELIO

Dos electrones orbitando alrededor de un núcleo, que consta de dos protones y dos neutrones, forman un átomo de Helio. Este elemento es el segundo más ligero y el segundo más abundante del Universo. Al igual que en el caso anterior, se plantean las ecuaciones de movimiento para las tres partículas, enseguida se asume



la aproximación electrostática y se desprecia la fuerza magnética. Posteriormente, se considera que a intervalos de tiempos pequeños el movimiento de cada una de las partículas es con aceleración uniforme. Estas ecuaciones permiten obtener la posición y la velocidad de cada una de ellas y de nuevo se regresan a las ecuaciones de movimiento para conocer la aceleración y así sucesivamente. Se buscan trayectorias estables que obedezcan los postulados Bohr.

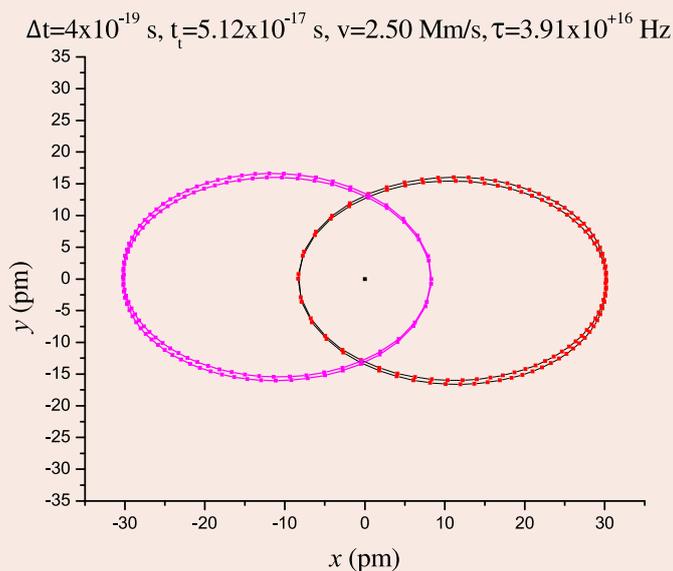


Figura 2. Trayectorias del núcleo (color negro), con las condiciones iniciales seleccionadas el núcleo está estacionario, para los electrones ligados (color magenta) y (color naranja). Tanto la posición inicial de los electrones como sus velocidades se seleccionan del tal manera que satisfagan la condición de Bohr, así como la energía experimental del estado base del átomo de Helio.

Como se puede observar en la figura 2, las trayectorias de los electrones son elípticas y no circulares como en la

figura 1. Esto puede ser así porque no se conoce la forma exacta teórica del estado base del átomo de Helio y esta se aproxima como la suma de dos átomos hidrogenoides.

Cabe mencionar que con el paso del tiempo surgieron otros modelos, de tal manera que a finales de la década de 1920 se tenían cuatro teorías para explicar los espectros de emisión y absorción del átomo de Hidrógeno: La teórica semiclásica de Bohr, la teoría relativista de Sommerfeld, la ecuación de Schrödinger y la ecuación relativista de Dirac.

CONCLUSIONES

El modelo de Bohr fue el primero que de una manera semi-clásica explicó los espectros de emisión y absorción del átomo de Hidrógeno. Se planteó un algoritmo numérico para estudiar la dinámica de átomos complejos, el cual está basado en la teoría de Bohr y en el movimiento uniformemente acelerado para tiempos infinitesimalmente pequeños. Se aplicó el formalismo al átomo de Hidrógeno con el fin de validar los resultados y luego se usó para estudiar el movimiento de los electrones y del núcleo en el átomo de Helio. Las trayectorias encontradas en este último caso son elípticas.

Como un comentario final, es necesario enfatizar que las trayectorias de los electrones y del núcleo son sólo dentro del contexto del modelo semi-clásico de Bohr. La mecánica cuántica, en su forma actual, no habla de trayectorias, sino de regiones donde puede encontrarse a las partículas.

BIBLIOGRAFÍA

- 1) Bohr, N. (1913). On the constitution of atoms and molecules. *Phil. Mag.* 26: 1-25.
- 2) Planck, M. (1901). On the law of distribution of the energy in the normal spectrum. *Ann. der Phys.* 4: 553.
- 3) Rutherford, E. (1911). The scattering of alpha and beta-particles by matter and the structure of atoms. *Phil. Mag.* 21: 669-698.
- 4) Goldstein, H., Poole, C. P. and Safko, J. L. (1999). *Classical mechanics*. 3rd Edition.