

MODELO DE CLASE DE ÁTOMOS HELIOIDES
Análisis de una regularidad en la energía del estado base de
los átomos de la serie helioide

CLASS MODEL OF HELIUM-LIKE ION ATOMS
Analysis of a regular behavior in the ground state energy of the
helium-like ion atom series

Gustavo Martínez Tamayo

Departamento de Física, Laboratorio de Implantación de Iones, Universidad Nacional de
Colombia, Bogotá, Colombia.

(Recibido: 03/2022. Aceptado: 03/2023)

Resumen

Cuando se aplicó anteriormente el modelo de Bohr para predecir la energía de estado fundamental de sistemas atómicos de dos electrones, se encontraron valores en exceso negativos de los reales, particularmente en las especies más livianas: ion negativo de hidrógeno y el helio. Inspirándose en el popular juego de las tronadoras y basándose en un comportamiento regular revelado por los datos experimentales, se propone una nueva interpretación ampliada del modelo de Bohr. Según éste, los electrones giran a una misma frecuencia mientras mantienen una posición angular relativa rígida entre sí, en el momento en que se espera que se produzca una resonancia electrónica entre posiciones simétricas en la estructura atómica. Como resultado, se obtiene una separación angular independiente de Z de 106° para los iones similares al helio, con una de discrepancia energética inferior al 0,04 % en el intervalo $Z \leq 12$. La simplicidad de la imagen atómica que emerge anima a utilizar el modelo como ayuda didáctica en física

moderna, química-física y otros cursos universitarios de ciencia e ingeniería.

Palabras clave: helioide, modelo de Bohr, sistema de dos estados, resonancia electrónica.

Abstract

When Bohr's model was formerly applied to predict the ground state energy of two-electron atomic systems, values in excess negative of the actual ones were found, mainly for the lighter species: negative hydrogen ion and helium. Inspired in the popular clackers toy game and based on a regular behavior revealed by the experimental data, an extended Bohr's model new rendition is proposed. According to that, electrons rotate at a same frequency while keeping a fixed relative angular position one to another, at the time that an electronic resonance is expected to occur between symmetrical positions in the atomic structure. As a result, a Z-independent angular separation of 106° is obtained for the helium-like ions, with an energy discrepancy bar less than 0,04 % in the range $Z \leq 12$. The simplicity of the atomic picture that emerges encourages the use of the model as a teaching aid in modern physics, chemistry-physics, and other university courses in science and engineering.

Keywords: helium-like ion, Bohr's model, two-state system, electron resonance.

Introducción

No obstante el comportamiento promedio que representa la nube esférica de carga negativa que rodea al núcleo atómico en el hidrógeno, y que comprueban numerosos experimentos usualmente en escalas de tiempo holgadamente superiores a 10^{-16} s, se presume que bien por debajo de este valor aún se podría hacer seguimiento al incesante movimiento del electrón alrededor del protón, en órbitas ya sean circulares, elípticas, lineales o en forma de roseta. Quizás entonces la existencia de un campo estocástico de fondo, que

perturbe al azar la trayectoria electrónica, obligando a la rotación del plano orbital (o algún otro mecanismo que haga precesar dicho plano) podría dar explicación al valor nulo efectivo que muestra el momento angular orbital del hidrógeno en estado fundamental, valor que predice correctamente la teoría de la mecánica cuántica para un electrón que, de acuerdo con el modelo de Bohr, rodea al protón con momento angular $l = \hbar$, haciendo congruentes teoría y modelo.

Cualquiera que sea la razón que hace al modelo de Bohr satisfactorio, es posible extender el mismo a sistemas atómicos de dos electrones en los que la inercia tan baja y la consiguiente respuesta casi inmediata del electrón permiten que éste cumpla en todo momento, no solo con la condición de correlación angular que llevaría a los electrones a extremos opuestos del diámetro orbital, sino que además diera cuenta del desequilibrio de carga que sugiere la existencia de la regularidad observada en las energías del estado base de las especies en cuestión.

En el contexto de la física atómica, existe hoy un interés renovado por aprovechar el valor pedagógico de los modelos semiclásicos basados en la noción de trayectoria de la antigua teoría cuántica. El modelo mejorado de Bohr-Sommerfeld extiende las formas orbitales del electrón de las circulares de Bohr a las elípticas y, entorno a ellas, cobra importancia la conexión existente entre el momento angular y la forma orbital: valores altos de momento angular se asocian más a órbitas circulares, mientras que valores bajos implican una mayor excentricidad orbital; el límite de momento angular nulo corresponde a órbitas lineales. En este último caso, se plantea la cuestión de si el movimiento de los dos electrones es alternado hacia el núcleo o simultáneo hacia él. Afín a esta discusión se enmarca el presente trabajo.

Se propone entonces como objetivo amplio explorar los alcances del modelo semiclásico de Bohr para la descripción de especies atómicas helioides y, como objetivo verificable, la predicción de la energía de estado base de tales especies. Previamente se discuten distintos aspectos que fundamentan la propuesta.

1. EXTENSIÓN DEL MODELO DE BOHR A ÁTOMOS DE DOS ELECTRONES

Existen en la literatura varios estudios exhaustivos referentes a modelos cuánticos, semiclásicos y clásicos, de sistemas atómicos de dos electrones, por ejemplo la revisión de Tanner *et al.* (2000)[1]. Publicaciones más recientes en relación al modelo extendido de Bohr y con el enfoque didáctico que se pretende desarrollar aquí, son las de Filgueiras *et al.* (2013)[2] y Persson (2021)[3], entre otras.

El presente trabajo tiene como base dos de los postulados del modelo bohreano, a saber:

- El electrón se desplaza sin radiar a lo largo de las órbitas circulares estacionarias centradas en el núcleo.
- El momento angular total se conserva en el valor dado por la regla de cuantización.

1.1. Energía del estado base sin interacción electrón-electrón

La energía de una especie atómica hidrogenoide de carga nuclear Z y en nivel de excitación n es $-E = \frac{Z^2}{2n^2}\epsilon_0$, donde $\epsilon_0 = e^2/a_0 = 27,21$ eV define el Hartree o unidad atómica de energía, $a_0 = 0,529$ Å es el radio de Bohr y define la unidad atómica de longitud.

En un helioide en estado arbitrario de excitación, con un electrón en nivel n_1 y otro en nivel n_2 , si no se considera la repulsión entre los dos electrones, la energía de la especie corresponde a la suma de las energías de cada orbital por separado.

$$-E = \frac{Z^2}{2} \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right) \epsilon_0$$

Para el estado base $1s^2$, $n_1 = n_2 = 1$ y la energía viene dada por $E = E_1 + E_2 = -Z^2\epsilon_0$. Para el átomo de helio con $Z = 2$ la energía del estado base es $-4\epsilon_0$, mientras que para el ión negativo del hidrógeno con $Z = 1$ la energía de estado base es $-\epsilon_0$. Ambos valores son lejanos a los valores experimentales respectivos, $-2,9037\epsilon_0$ y $-0,528\epsilon_0$.

La magnitud física asociada al estado base de más fácil determinación experimental es la energía de ionización, entendida como la energía necesaria para liberar el electrón atómico más externo; y la predicción acertada de esta energía es el primer resultado cuantitativo que se exige de un modelo teórico. Su valor se obtiene de restar la energía del sistema atómico luego de la ionización, de aquella correspondiente al estado base inicial; esto es, $I = E_0 - E$. Las energías de ionización para He y H^- , en aproximación de electrones no interactuantes son $I_{He} = 2\varepsilon_0$ e $I_{H^-} = 0,5\varepsilon_0$, muy por encima de los valores experimentales respectivos $0,9037\varepsilon_0$ y $0,028\varepsilon_0$.

1.2. Energía del estado base con interacción electrón-electrón

1.2.1. Configuración con los electrones en línea con el núcleo

En electrostática, al alinear una carga central $+Ze$, que permanece fija en el origen, con dos cargas laterales idénticas $-e$, dispuestas de forma simétrica a lado y lado y a distancia finita a de la carga central, se ejerce sobre cada una de las cargas laterales una fuerza eléctrica de magnitud $f = (Z - 1/4)(e/a)^2$ tal que para $Z \geq 1$ esta configuración colapsa hacia el origen. Pero si damos un impulso inicial por igual a las cargas laterales, en dirección perpendicular a la línea de separación y en un sentido tal que la fuerza eléctrica neta proporcione la fuerza centrípeta de un MCU de radio a alrededor de la carga central, el movimiento se hará estacionario, dos de los requerimientos de las órbitas de Bohr.

En el modelo extendido, las energías de estado base e ionización dependen de la repulsión que hace a los electrones evitarse todo lo posible, y una forma simple de lograrlo es ubicando los electrones en extremos opuestos del diámetro de un orbital de Bohr. Para tal configuración, según se desprende del análisis realizado en el párrafo inmediatamente anterior, la condición de equilibrio electromecánico para cada uno de los electrones que orbitan en posiciones diametralmente opuestas es,

$$\frac{mv^2}{a} = \left(Z - \frac{1}{4} \right) \frac{e^2}{a^2} \quad (1)$$

El último término de interacción electrón-electrón y su precedente de interacción núcleo-electrón se han factorizado para dar forma a una fuerza central efectiva, por lo que la substitución directa de Z por $(Z - 1/4)$ en las distintas ecuaciones del modelo de Bohr para los hidrogenoides (aquellas que permiten hallar a , v , U , E , etc.), conduce a los resultados de este modelo extendido ¹. En particular, las energías de estado base e ionización son:

$$\begin{aligned} -E &= (Z - 1/4)^2 \varepsilon_0 \\ I &= \left[(Z - 1/4)^2 - Z^2/2 \right] \varepsilon_0 \end{aligned} \quad (2)$$

Siendo los valores para el helio y el ión negativo del hidrógeno respectivamente,

$$-E_{He} = 3,06\varepsilon_0, I_{He} = 1,06\varepsilon_0, -E_{H^-} = -0,5625\varepsilon_0, I_{H^-} = 0,0625\varepsilon_0$$

El desacuerdo con la energía de estado base experimental del He es ahora de un 5,4 % por defecto, de modo que el valor de ionización se encuentra un 18 % por encima del valor real, mientras que en el caso del ión H^- dichos porcentajes corresponden al 6,5 % por defecto y 123 % por exceso de los valores experimentales respectivos.

Es de esperar un aumento de los valores de energía todavía en exceso negativos del helio y del anión hidrógeno si, al igual que Harcourt (1983)[4], se considera que los electrones permanecen en una misma órbita circular pero se ubican, ya no sobre el diámetro, sino en los extremos de una cuerda.

¹La cantidad $(Z - 1/4)$ se interpreta como que el electrón “ve” una carga nuclear reducida en la cantidad $\sigma = 1/4$ por efecto de la proximidad del segundo electrón. Se define en general $Z_{ef} = Z - \sigma$ como la carga nuclear efectiva, y es tarea de varios modelos y teorías predecir el valor del parámetro de apantallamiento σ que lleva al mejor valor de la energía según la ecuación $-E = (Z - \sigma)^2 \varepsilon_0$ [2].

1.2.2. Configuración con los electrones desalineados (modo TicTac)

El modelo extendido de Bohr expuesto recién (Barrachina, 1993)[5], implícitamente obvia el carácter oscilante que podrían presentar entre sí los dos electrones en órbita circular alrededor del núcleo. Equivale a afirmar que los electrones se mueven en fase, pero el principio de incertidumbre prohíbe tal situación al asegurar una energía no nula para el estado base del oscilador cuántico.

En el modelo planetario, una imagen tentativa que incorpora este grado de libertad se ilustra en la Figura 1. En ella, los dos electrones se ubican levemente por encima de la línea diametral dando origen a dos contribuciones de fuerza restitutiva: la primera proviene de la atracción neta que ejerce el núcleo sobre el par de electrones para llevarlos a la posición diametral de equilibrio (la línea ecuatorial en analogía con la del globo terráqueo); la segunda es la repulsión mutua entre los electrones, que en primera instancia pareciera no intervenir, al no ocurrir cambio apreciable de la distancia de separación inter-electrónica y así, la componente x de la fuerza eléctrica permanecería constante. Aunque esta imagen simplificada abre ya la posibilidad a un comportamiento oscilatorio, al final de esta sección se habrá mostrado que un tratamiento aproximado no es el adecuado tanto porque el ángulo θ resulta no ser pequeño, como por la sencillez de la ecuación de fuerza que admite una solución exacta, sin necesidad de aproximación alguna. Por otra parte, es claro que esta configuración incrementa la energía atómica respecto al caso de electrones alineados.

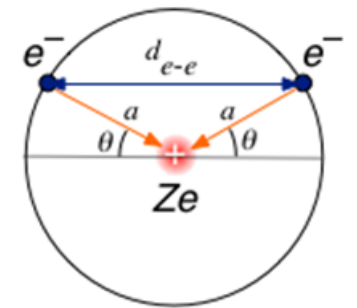


FIGURA 1. Configuración de electrones desalineados.

Al analizar con mayor detalle la fuerza sobre un electrón en coordenadas cartesianas (Figura 2, mitad izquierda), se observa que ésta se reduce a la componente vertical f_y de la fuerza de Coulomb, es decir, $f_y = Ze^2 \sin \theta / a^2$. Por su parte, la componente horizontal, $f_x = [Z \cos \theta - 1 / (4 \cos^2 \theta)] e^2 / a^2$, en el límite $\theta = 0$ se reduce correctamente a $f = (Z - 1/4)e^2 / a^2$, la fuerza total sobre el electrón que exige el modelo extendido en línea en la ecuación 1.

Resumiendo, en coordenadas cartesianas las componentes y y x de la fuerza eléctrica sobre un electrón respectivamente son:

$$f_y = \frac{e^2}{a^2} Z \sin \theta$$

$$f_x = \frac{e^2}{a^2} (Z \cos \theta - 1 / (4 \cos^2 \theta))$$

Y para un ángulo θ dado, el requisito a cumplir por la fuerza eléctrica para hacerse al papel de fuerza centrípeta es que,

$$\frac{mv^2}{a} = \frac{e^2}{a^2} \sqrt{\left(Z \cos \theta - \frac{1}{4 \cos^2 \theta}\right)^2 + (Z \sin \theta)^2} = \frac{e^2}{a^2} \sqrt{Z^2 - \frac{Z}{2 \cos \theta} + \frac{1}{16 \cos^4 \theta}}$$

Como será aparente más adelante, la cantidad bajo el radical no es otra cosa que la magnitud de la energía en unidades atómicas y, aunque por ahora la simplicidad del modelo no permite establecer el valor corregido de la energía del sistema atómico (se desconoce θ), sí es suficiente para revelar una regularidad de dicha corrección como función de Z , para lo cual conviene expresar la energía como:

$$-E = \left(Z - \frac{1}{4}\right)^2 - \frac{Z}{2} \left(\frac{1}{\cos \theta} - 1\right) + \frac{1}{16} \left(\frac{1}{\cos^4 \theta} - 1\right)$$

Una inspección cuidadosa a la Tabla 1 permite establecer los valores empíricos tanto del coeficiente en Z como del término independiente, 0,125 y 0,0905 respectivamente, por lo cual

$$-E = (Z - 1/4)^2 - 0,125Z + 0,0905$$

Para escribir la última ecuación se ha aceptado de manera temeraria, que el alejamiento del equilibrio que θ expresa es similar (de hecho el mismo, $\theta = 0,6435$) en todas las especies atómicas,

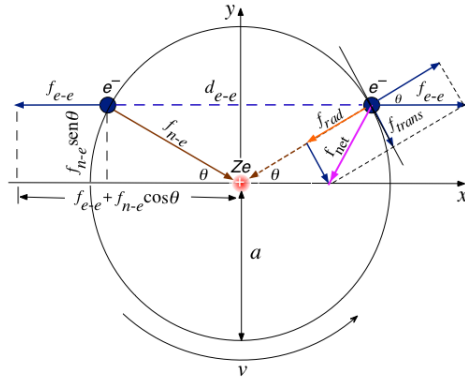


FIGURA 2. Descomposición de la fuerza de interacción eléctrica en coordenadas cartesianas centradas en el núcleo (semicírculo izquierdo) y centrado en el electrón (semicírculo derecho). a es el radio de la especie, d_{e-e} es la distancia inter-electrónica, y v , la velocidad tangencial a la que los electrones circundan el núcleo.

lo que hace que el último término reduzca la energía a un valor aún más negativo que el que suministra en el primer término el modelo de Bohr. La posible oscilación o conmutación resonante que alterna permanentemente al electrón entre los ángulos θ y $-\theta$, ocurriría sin perjuicio de la velocidad de giro que requiere el modelo bohreano para conservar el momento angular $l = \hbar$ (Figura 3). Sin embargo, la dependencia cuadrática en l , inherente al modelo de Bohr, habilita también un modo de oscilación o conmutación en el que un electrón recorre su propio trayecto orbital en sentido contrario a como lo hace el otro electrón (Figura 4).

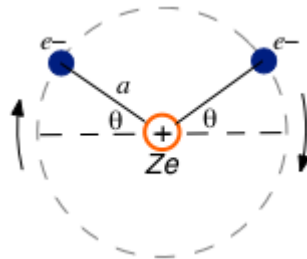


FIGURA 3. Helioides de carga nuclear Z . Los electrones giran con igual frecuencia y sentido pero las líneas radiales subtenden un sector circular de apertura angular fija $\pi - 2\theta$, independiente del tiempo.

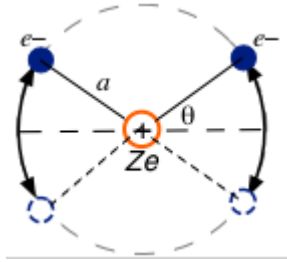


FIGURA 4. Opcionalmente en el sistema de referencia en rotación se observan dos electrones en condición resonante. La configuración atómica con los dos electrones arriba (abajo) conmuta a la posición simétrica con los dos electrones abajo (arriba). Dado que el modelo depende cuadráticamente de l , es posible que ésta sea una representación más cercana a la realidad de los helioides y al hecho que $l_{total} = 0$ para el helio en el estado base.

Energía Especie	Experimento	$\sigma = 1/4$	Error (%)	$\sigma = 5/16$	Error (%)	$(\Delta E)^Z$	$\Delta E^{Z+1} - \Delta E^Z$	E'TicTac
H ⁻	0,5278	0,5625	6,49	0,4727	-10,37	0,03475	—	0,5276
He	2,9037	3,0625	5,46	2,8477	-1,93	0,15878	0,124	2,9026
Li ⁺	7,2799	7,5625	3,88	7,2227	-0,78	0,28259	0,1238	7,2776
Be ⁺²	13,6556	14,0625	2,98	13,5977	-0,42	0,40694	0,1244	13,6526
B ⁺³	22,031	22,5625	2,39	21,9727	-0,27	0,53153	0,1246	22,0276
C ⁺⁴	32,4062	33,0625	2,02	32,3477	0,18	0,65626	0,1247	33,4026
N ⁺⁵	44,7814	45,5625	1,7	44,7227	-0,13	0,78106	0,1248	44,7776
O ⁺⁶	59,157	60,0625	1,47	59,977	-0,1	0,90591	0,1249	59,1526
F ⁺⁷	75,5317	76,5625	1,3	75,4727	-0,08	1,03079	0,1249	75,5276
Ne ⁺⁸	93,9068	95,0625	1,12	913,8477	-0,06	1,1557	0,1249	93,9026
Na ⁺⁹	114,2819	115,5625	1	114,2227	-0,05	1,28062	0,1249	114,2776
Mg ⁺¹⁰	136,6569	138,0625	0,87	136,5977	-0,04	1,4056	0,125	136,7526
Ca ⁺¹⁸	387,66	390,0625	0,62	387,5977	-0,016	—	—	387,6526

TABLA 1. Energías del estado base para las primeras doce especies de la serie isoelectrónica del helio en el modelo de Bohr con parámetros de apantallamiento $\sigma = 1/4$ (col. 3) y $\sigma = 5/16$ (col. 5) y en el modelo TicTac (col. 9), versus valores experimentales. Además diferencia ΔE^Z entre $E_{\sigma=1/4}$ y experimento (col. 7) para la especie con carga nuclear Z . Por último, diferencia $(\Delta E)^Z$ entre Z consecutivos (col 8). Valores col. 2 según Freund et. Al., (excepto magnesio)[6]. Mg según Trakkar y Smith (1977)[7].

Una primera inspección a la Tabla 1 permite apreciar que el efecto resonante es casi imperceptible en los iones atómicos pesados, pero decisivo en el comportamiento del helio y del ión negativo de hidrógeno. El valor resaltado, por ejemplo, indica que la optimización variacional de la energía que representa la columna 5, lleva a que el ión H⁻ no podría existir al ser inestable

frente a la permanencia como átomo neutro más un electrón libre. Tal situación de inexistencia se presenta también en las predicciones del modelo de Hartee-Fock y de la teoría de la Funcional Densidad, teorías que por su naturaleza estadística son útiles en sistemas de muchos electrones, pero yerran los sistemas más simples.

En relación con la tabla, la regularidad anunciada se presenta entonces al considerar el error en la energía del modelo extendido con respecto al valor experimental (col. 3 menos col. 2). Resulta ser que la resta de los errores correspondientes a cualesquiera dos especies de Z consecutivo, es un valor constante de aproximadamente $0,125\varepsilon_0$ (col. 8).

Si el modelo extendido es adecuado para representar el movimiento orbital de los dos electrones, podemos estar en presencia del grado de libertad adicional de tipo oscilador armónico antes mencionado. Pero mientras se discute esta posibilidad, la regularidad sí nos provee de una fórmula recurrente que permite conocer con buena aproximación, la energía de las distintas especies atómicas isoelectrónicas al helio².

$$E_{\sigma=1/4}^Z - E^Z = \Delta E^Z = \Delta E^{Z-1} + 0,125$$

que aplicada de manera reiterada hasta alcanzar $Z = 1$ se reduce a conocer E_{H^-} (el valor $0,528\varepsilon_0$ que aparece en segunda fila de la col. 2 en la Tabla 1). Al sustituir $E_{\sigma=1/4}^Z$ mediante el uso de la Ecuación 2 se obtiene la energía base del heliide de carga nuclear Z , en la forma,

$$-E^Z = -E_{\sigma=1/4}^Z + E_{\sigma=1/4}^{H^-} - E^{H^-} - (Z - 1)/8$$

o equivalentemente,

$$-E = \left(Z - \frac{1}{4}\right)^2 - \frac{Z}{8} + 0,0905 \quad (3)$$

igualdad empírica que ajusta el modelo extendido de Bohr al valor real de la energía, incluyendo el aumento escalonado de $0,125\varepsilon_0$ por cada incremento en Z (que proviene de la regularidad observada),

²En lo que respecta a la Tabla 1 y lo que resta de este apartado el superíndice en Z no significa elevar a esta potencia, sino que refiere la especie atómica de tal carga nuclear.

mientras que el término numérico no resulta fácil de interpretar en el esquema de Bohr.

Si en lugar del cuadrado perfecto de la ecuación 2 que nos refiere al modelo de Bohr, se completa el cuadrado tal como se indica en (4), se alcanza entonces una ecuación de ajuste susceptible de una interpretación satisfactoria.

$$-E = Z^2 - \frac{5}{8}Z + \left(\frac{5}{16}\right)^2 + 0,05534 = \left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 + 0,23525^2 \quad (4)$$

En cualquier caso, la igualdad más simple para determinar la energía del estado base de un helioide, rotulada como la fórmula empírica de la energía del estado base, está dada por:

$$-E = Z^2 - \frac{5}{8}Z + 0,153 \quad (5)$$

se destaca la concordancia que muestra la ecuación 5 con la presentada por Persson en su página 6[3].

Para examinar el término de binomio cuadrado perfecto en la ecuación 4, previamente se ha establecido que $-Z^2$ es la energía que poseen dos electrones no interactuantes que rodean un núcleo de carga Z , mientras que $+5/8Z$ es la corrección debida a la interacción electrostática entre las dos distribuciones concéntricas e interpenetradas de carga, del estado $1S$ del átomo hidrogenoide correspondiente; de modo que (4) bien podría representar la evolución radial con compromiso angular (entiéndase el desplazamiento) de la distribución de carga, desde aquella de dos nubes esféricas e interpenetradas, centradas en el núcleo, con un alto grado de repulsión electrostática y cuya energía [8] $-E = Z^2 - 5/8Z$ se muestra sistemáticamente por encima de los valores experimentales, provocando incluso en el caso $Z = 1$ ($-E = 0,375 \varepsilon_0$) la ionización espontánea del ion H^- frente al H^0 (canal que no se observa); hasta la configuración de menor energía que resulta ser aquella en la que cada electrón “ve” al otro como una carga puntual localizada a una distancia efectiva $d = 4a\sqrt{5}$. Este alejamiento efectivo hasta una separación $d < 2a$, acompañado del cambio de forma de nube esférica a una más localizada, implica una reducción en energía de $0,0977 \varepsilon_0$ con respecto a la configuración

con $-E = Z(Z - 1/8)$, y es la energía que corresponde al término $-E = (Z - 5/16)^2$.

Desde el otro extremo, una reducción del tamaño $2a$ de la órbita de Bohr hasta la anterior distancia efectiva d , incrementa la energía en exceso negativa que caracteriza al modelo bohreano a valores levemente más favorables. Que la configuración con parámetro de apantallamiento $\sigma = 5/16$ garantiza la menor energía para funciones de onda hidrogenoides es un resultado bien establecido de aplicación del cálculo variacional[8]. Análogamente, el término numérico 0,23525 sugiere un desplazamiento transversal de las distribuciones esféricas de carga negativa en relación al núcleo. Se aprecia mejor la situación al factorizar (5) en sus raíces complejas,

$$-E = [(Z - 5/16) + 0,23525i][(Z - 5/16) - 0,23525i]$$

que reescrito en la forma $-E = (Z - 5/16)^2 + 0,05534$ recupera, con el primer término, el valor de la energía optimizada variacionalmente (col. 5 de la Tabla 1). En cuanto al segundo término, es un valor constante que lleva al valor correcto de la energía y del cual podría decirse que, al provenir de la parte imaginaria, ortogonal a la parte real de las raíces (que en este caso serían de carácter radial), se trata de una contribución independiente, de índole transversal, y por ello simplemente suma a la energía atómica.

Desde el punto de vista de la fuerza, la similitud evidente del factor de carga efectiva $(Z-1/4)$ en la expresión de la fuerza eléctrica neta que se ejerce sobre el electrón en la dirección radial (ecuación 1), con el factor correspondiente $(Z-5/16)$ de la fórmula empírica, sugiere que este último es el verdadero valor experimental asociado a la componente radial de la fuerza y que, en consecuencia, el término numérico 0,23252 lo sería a la componente transversal. De hecho, la aplicación del principio variacional al sistema de dos electrones confinados por un núcleo, cuya función de onda del estado base se aproxima al producto de dos funciones hidrogenoides de carga nuclear efectiva $Z-\sigma$ (σ es el parámetro variacional a determinar) y la interacción electrón-electrón considerada como una perturbación, corrobora la asociación dada a las componentes, al encontrarse

que $\sigma = 5/16$ minimiza la energía del helioide (Campos, 1997)[9]. La última igualdad implica de paso la equivalencia del cálculo de perturbaciones a primer orden con el resultado del modelo extendido de Bohr para electrones desalineados cuando tan sólo se considera la componente radial de la fuerza $f_{rad} = e^2(Z-5/16)/a^2$, dejando de lado la componente transversal (columna 5 en tabla 1).

Un análisis detallado al movimiento curvilíneo del electrón revela que, en efecto, el término numérico se asocia a la componente de aceleración transversal. Por lo demás, discrepancias inferiores al 0,04% con respecto a los valores tabulados permiten juzgar la factibilidad de la interpretación.

1.3. Análisis del movimiento curvilíneo en el modo TicTac

El punto de partida es el caso en el cual los electrones no se disponen en los extremos de una línea diametral ($\theta = 0$). En su lugar se disponen sobre los extremos de una cuerda que subtiende un ángulo fijo $\pi-2\theta$ con respecto al núcleo.

Para abrir la discusión, la expresión de la fuerza eléctrica para el movimiento curvilíneo, escrita en términos de dos componentes ortogonales: una componente radial³ (dirigida hacia el núcleo) y una componente transversal es (ver semicírculo derecho en Figura 3),

$$\vec{f} = \frac{e^2}{a^2} \left(Z - \frac{1}{4 \cos \theta} \right) \hat{u}_R + \frac{e^2}{a^2} \frac{\tan \theta}{4 \cos \theta} \hat{u}_T$$

donde \hat{u}_R y \hat{u}_T son vectores unitarios; el primero apunta hacia el núcleo y el segundo, normal al primero, en general no es tangente a la trayectoria. La expresión equivalente en coordenadas cartesianas es (ver semicírculo izquierdo en Figura 3),

$$\vec{f} = \frac{e^2}{a^2} \left(Z \cos \theta - \frac{1}{4 (\cos \theta)^2} \right) \hat{i} + \frac{e^2}{a^2} Z \sin \theta \hat{j}$$

³La fuerza eléctrica radial atractiva que ejerce el núcleo sobre el electrón, disminuida en el valor de la componente en dirección radial de la fuerza repulsiva existente entre los dos electrones.

Como control de validez se verifica fácilmente que $f_{rad}^2 + f_{trans}^2 = f_x^2 + f_y^2$; es decir, que la norma de la fuerza es la misma en ambos sistemas inerciales de referencia.

Este modelo de fuerza central en realidad posee una componente de la fuerza neta que no se dirige en dirección radial con ángulo θ , sino en la dirección ϕ dada por $\tan\phi = f_y/f_x$ (ver Figura 2). Tentativamente, puede anotarse a la componente radial como soporte del movimiento circular en ángulo $\pm\theta$ y a la componente transversal como la responsable de las respectivas transiciones al ángulo opuesto $\mp\theta$, pero la propuesta va un poco más allá al afirmar que la estructura atómica en ningún momento pierde la esfericidad. Se retiene así la aplicabilidad del modelo de Bohr.

Es decir, se restituye parcialmente el aspecto esférico reconocido en los helioides haciendo notar que aunque la fuerza neta instantánea no apunta en general hacia el núcleo, sí lo hace la superposición resonante entre los dos estados θ y $-\theta$. Al mismo tiempo, que se involucra el carácter esférico propio de la función de onda hidrogenoide $1s$, al substituir el parámetro de pantalla variacionalmente determinado $\sigma = 5/16$ en la ecuación de equilibrio electromecánico orbital.

Se integran así características del modelo de Bohr a la descripción cuántica a nivel de la teoría de perturbaciones a primer orden, con mejora ostensible sobre el resultado de cualquiera de ellas. Veamos los detalles del modelo:

En una configuración con electrones desalineados ($\theta \neq 0$), la condición de equilibrio electromecánico agrega a la fuerza atractiva radial que ejerce el núcleo sobre el electrón, las componentes radial y transversal de la fuerza interelectrónica $f_{e-e} = e^2/d_{e-e}^2$, donde $d_{e-e} = 2a \cos\theta$ (Figura 2, semicírculo derecho). Juntas constituyen la fuerza eléctrica neta que proporciona la fuerza centrípeta, perpendicular a la velocidad, capaz de mantener al electrón en trayectoria circular de radio a alrededor del núcleo⁴, salvando así la

⁴Aunque el centro de fuerza permanentemente alterna su posición a lado y lado del núcleo, sobre la línea polar, la conservación detallada del momento angular justifica suponer al núcleo como el centro de fuerza y a a como la distancia de éste al electrón.

aplicación del modelo de Bohr. Se establece entonces la condición de equilibrio electromecánico mediante la ecuación siguiente:

$$\frac{mv^2}{a} = \frac{e^2}{a^2} \sqrt{\left(Z - \frac{1}{4 \cos \theta}\right)^2 + \left(\frac{\tan \theta}{4 \cos \theta}\right)^2}$$

Para una disposición angular determinada, la igualdad anterior fija el compromiso que existe entre el tamaño de la órbita circular y la velocidad de tránsito del electrón a lo largo de la misma, como lo expresa el producto $v^2 a$.

En un siguiente paso, la conservación de momento angular en el valor de cuantización fija el tamaño de la órbita. Específicamente, dado que $mv^2/a = l^2/(ma^3)$ y que además, en el estado base $l = \hbar$, al despejar el radio a de la especie atómica se obtiene,

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} / \sqrt{\left(Z - \frac{1}{4 \cos \theta}\right)^2 + \left(\frac{\tan \theta}{4 \cos \theta}\right)^2}$$

Esta ecuación, al igual que su representación gráfica (Figura 5), se constituyen en loci de los posibles radios atómicos en el modelo de Bohr. Al llevar de vuelta el valor de a aquí encontrado a la ecuación de equilibrio orbital, y despejando la energía cinética K se obtiene,

$$K = mv^2 = \frac{me^4}{\hbar^2} \left[\left(Z - \frac{1}{4 \cos \theta}\right)^2 + \left(\frac{\tan \theta}{4 \cos \theta}\right)^2 \right]$$

La Figura 5 ilustra lo que podría llegar a ser la trayectoria detallada del electrón en el modelo de Bohr, modo TicTac (en este caso del ión negativo de hidrógeno). Para el propósito didáctico de este trabajo basta imaginar a los electrones orbitando alrededor del núcleo con movimiento circular uniforme (MCU), y cuyos radios vectores forman entre sí un ángulo fijo $\pi - 2\theta$ (al MCU se superpone la conmutación resonante del electrón entre los ángulos $+\theta$ y $-\theta$)⁵.

⁵Se estima que este modelo responde al comportamiento promedio del electrón recorriendo su órbita, motivo por el cual mv^2 correspondería a la energía cinética promedio de los dos electrones, energía que de acuerdo con el teorema del Virial es igual a la magnitud de la energía atómica total $-E$.

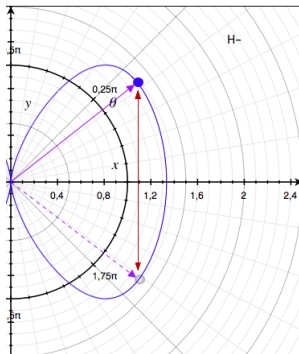


FIGURA 5. Gráfico polar de tamaño del helioide vs ángulo que forman los electrones en MCU para H^-

En la imagen “rígida” de la especie helioide aquí construida, en la que el ángulo $\pi - 2\theta$ que subtenden los radios que van del núcleo a cada electrón permanece fijo, mientras estos orbitan en movimiento circular uniforme, la energía cinética permanece constante. En consecuencia, el teorema del Virial en su forma simple, $K = -E$, permite encontrar la forma funcional en θ que, de conformidad al modelo de Bohr, debe cumplir la ecuación de la energía de una especie helioide en el estado fundamental. Expresada en unidades atómicas o hartrees la ecuación es:

$$-E = \left(Z - \frac{1}{4 \cos \theta} \right)^2 + \left(\frac{\tan \theta}{4 \cos \theta} \right)^2 \quad (6)$$

Con el fin de determinar la posible real configuración angular, y con ella la ecuación definitiva de la energía base del helioide, se recurre al criterio de mínima energía.

La optimización de la energía en función del ángulo θ , de hecho arroja algún indicio sobre el real ángulo que formarían los electrones en las especies helioides. Por ejemplo, del método habitual de igualar a cero la derivada de E respecto a θ se llega a la condición $2Z(\cos \theta)^3 = 1$, cuya solución es $\theta = 0,6539$. Devolviendo este valor a 6 y haciendo $Z = 1$, se obtiene el valor de energía mínima para el ión negativo del hidrógeno, $-E_{H^-} = 0,52724 \epsilon_0$, el cual ocurre para la distancia $a = 1.377a_0$. Es decir, en H^- la configuración angular con $\theta \approx 37,5^\circ$ es tal que el radio atómico alcanza su máximo y la

energía toma su valor mínimo, el que prácticamente coincide con la energía nominal del ión (porcentaje de error ΔE de apenas 0,04 %).

Sin embargo, en el helio el ejercicio resulta menos alentador. De la condición de extremo se obtiene que $-E_{He} = 2,8094 \varepsilon_0$ en $\theta = 0,8893$, lo que conlleva un error porcentual ΔE del 3,24 %. Para Z mayores la predicción empeora gradualmente, alcanzando el valor máximo $\Delta E = 5,39\%$ en el nitrógeno. A partir de $Z = 7$ este porcentaje disminuye, ubicándose por ejemplo en el 3,43 % en Ca^{+18} , cuando $\theta = 1,274$. De lo anterior se concluye que, aunque el ángulo θ para el cual el radio es máximo y la energía mínima no coincide con la apertura angular, sí se le parece. Llama poderosamente la atención que para el ángulo fijo $\theta = 0,6435$ se reproducen todos los valores aceptados de energía en el estado fundamental de la serie helioide, con exactitudes mejores que el 0,04 %, lo que indicaría que el ángulo que subtienden los electrones, tomando como vértice el núcleo, es constante ($106,2^\circ$) e independiente de Z .

Afortunadamente la teoría cuántica de perturbaciones a primer orden de aproximación, con función de onda hidrogenoide para el electrón, provee el valor del parámetro variacional de apantallamiento, $\sigma = 5/16$, que optimiza la energía del estado base en los modelos de carga nuclear ya mencionados en el pie de página (2), con resultado $-E = \left(Z - \frac{5}{16}\right)^2$.

Identificando el valor $\sigma = 5/16$ con el del cociente $((4 \cos \theta)^{-1})$ en la ecuación (6), se da forma definitiva a la fórmula para el cálculo de la energía del estado base de la serie isoelectrónica del helio, en el modo TicTac (columna 9 en tabla 1), siendo éste el principal resultado tangible del modelo propuesto, a saber:

$$-E = \left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 + \left(\frac{15}{64}\right)^2$$

En síntesis, una aplicación informal y más bien circunstancial antes que rigurosa del modelo de Bohr, que no ofrece una imagen unívoca de la estructura helioide al heredar de este modelo la ambigüedad que implican dos posibles representaciones, una con momento angular total $L = 0$ (los electrones giran en orbitales distintos y en sentido opuesto), otra con $L = 2$ (los electrones giran en el

mismo orbital y en el mismo sentido), predice satisfactoriamente las energías del estado base de la familia helioide. La falta de certeza de la trayectoria real del electrón hace incierta la aplicación del modelo a átomos de dos electrones activos tales como berilio, calcio, magnesio e incluso mercurio. Se recomienda avanzar en el análisis de probables trayectorias del electrón, quizás en base a las reglas de cuantización de las variables de acción.

Conclusiones

- Arguyendo condiciones promedio de fuerza central y esfericidad propias del estado fundamental de las especies helioides, se aplicó el modelo de Bohr a sistemas atómicos de dos electrones para determinar el tamaño y la energía correspondientes. La dependencia de la fuerza con la posición angular del electrón, que hacía prever una trayectoria curvilínea de aceleración variable, se redujo a la de un movimiento circular uniforme de radio a alrededor del núcleo, donde

$$a = a_0 / \sqrt{\left(Z - \frac{1}{4 \cos \theta}\right)^2 + \left(\frac{\tan \theta}{4 \cos \theta}\right)^2}$$

- Alternativamente, dada la dependencia cuadrática en l , propia del modelo bohreano, el movimiento de los electrones bien podría ocurrir en sentido contrario uno al otro, más que en un mismo sentido, en concordancia con el valor nulo que registra el momento angular total del helio (Figura 3). Se estima entonces que el modelo presentado podría corresponder al comportamiento cíclico promedio del electrón recorriendo la órbita de la Figura 3, en cuyo caso mv^2 representaría la energía cinética electrónica promedio, que de acuerdo con el teorema del Virial, equivale al negativo de la energía atómica total E . De ser así, es también probable que la fuerza eléctrica promediada a un ciclo resulte dirigida hacia el núcleo, resolviendo esta limitación inherente al modelo propuesto.

- El ángulo $\phi = \pi - 2\theta$ que forman entre sí los dos electrones, tomando como vértice el núcleo, es de 106° independiente de Z , lo que genera un desequilibrio de carga, y en consecuencia, la fuerza restauradora que mantiene el mecanismo de oscilación/conmutación. Es éste el mecanismo que impide alcanzar la energía tan baja que predice el modelo extendido con los electrones alineados con el núcleo ($d_{e-e} = 2a$).
- La posición angular desplazada de los electrones con respecto al eje de simetría que pasa por el núcleo resulta factible, como se verifica de la exactitud de los valores de energía obtenidos para el estado base (discrepancia menor que 0,04 % en las dos especies más críticas, el ión negativo de hidrógeno y el helio).
- La forma funcional deducida para la energía del estado base $-E = \left(Z - \frac{1}{4\cos\theta}\right)^2 + \left(\frac{\tan\theta}{4\cos\theta}\right)^2$, es tal que al hacer corresponder el parámetro de apantallamiento variacionalmente determinado para optimizar esta energía en la aproximación de primer orden de teoría cuántica de perturbaciones $\sigma = 5/16$, con el término $(4\cos\theta)^{-1}$, obtiene finalmente la energía del helioide de carga nuclear Z , $-E = \left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 + \left(\frac{15}{64}\right)^2$.
- Más allá del aspecto electromecánico del modelo, se espera que la posición angular de cada electrón resuene entre los ángulos θ y $-\theta$ ($\theta = 36, 87^\circ$), a causa del campo eléctrico que genera el desequilibrio de carga (modo TicTac).
- Finalmente, se hace énfasis en la simplicidad del modelo, que lo hace complemento apropiado para la enseñanza de modelos atómicos elementales.

References

- [1] G. Tanner, K. Richter, and J.-M. Rost, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 497 (2000).

-
- [2] C. A. L. Filgueiras, J. P. Braga, and N. H. T. Lemes, *Quim. Nova* **36**, 1078 (2013).
 - [3] R. A. X. Persson, *Eur. J. Phys.* **42**, 055403 (2021).
 - [4] R. Harcourt, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16**, 2647 (1983).
 - [5] R. O. Barrachina, *Temas de mecánica cuántica* (1993).
 - [6] D. E. Freund, B. D. Huxtable, and J. D. Morgan, *Phys. Rev. A* **29**, 980 (1984).
 - [7] A. J. Thakkar and V. H. Smith, *Phys. Rev. A* **15**, 1 (1977).
 - [8] E. Landau, L. y Lifchitz, *Quantum Mechanics Non-relativistic Theory*, Vol. 3 (Pergamon Press, 1967) p. 286.
 - [9] D. Campos, *Fundamentos de Física Atómica y Molecular*, Vol. 3 (Universidad Nacional de Colombia, 1997) p. 286.