

GENERALIZACIÓN DE LA RELACIÓN DE LORENTZ-LORENZ

Sergio Moltó González¹, María Ana Sáenz Nuño², Eusebio Bernabeu Martínez¹

¹Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias 1, 28040, Madrid, España

²Instituto de Investigación Tecnológica, Escuela Técnica Superior de Ingeniería-ICAI,

Universidad Pontificia Comillas, Calle de Alberto Aguilera 25, 28015, Madrid, España

Resumen: La relación de Lorentz-Lorenz es una ecuación fundamental en óptica que relaciona las propiedades dieléctricas de un medio con su polarización, aunque su formulación clásica presenta limitaciones para describir sistemas no ideales. Frente a las extensiones basadas en la expansión del virial, este trabajo propone una generalización que incorpora la geometría molecular mediante un parámetro de forma relacionado con la esfericidad de las moléculas. Para ello, se estudia la relación entre el factor de forma y la geometría molecular, requiriéndose una determinación precisa del volumen y la superficie molecular. Mientras que el volumen se obtiene mediante integración, la superficie se calcula mediante el algoritmo convex hull, que permite aproximar la geometría molecular y reducir la dependencia del resultado respecto al mallado. Estos métodos permiten establecer una extensión de la relación de Lorentz-Lorenz basada en la geometría molecular y alternativa al uso de coeficientes del virial.

Introducción:

La ecuación de Lorentz-Lorenz expandida se conoce tradicionalmente por la siguiente relación:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = A_r \cdot \rho + B_r \cdot \rho^2$$

Sin embargo en [1] se propuso un nuevo parámetro llamado “Shape Factor” (τ), que la reduce en lo siguiente:

$$\frac{n^2 - 1}{3(n^2 \epsilon_0 \tau - \epsilon_0 \tau + 1)} = A_r \cdot \rho$$

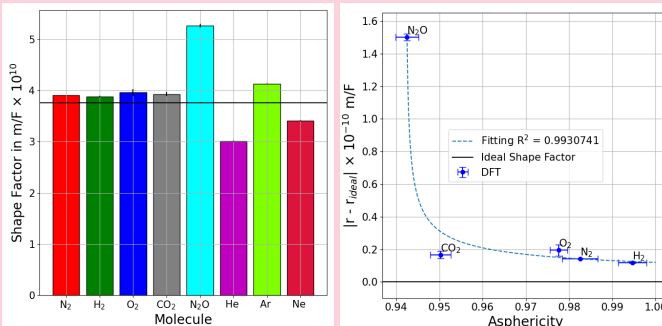
Relación con “Shape Factor”:

El shape factor de estas moléculas se obtiene a través de los coeficientes del virial [1].

La relación entre la geometría molecular y el “Shape Factor” se busca a través de la Asfericidad molecular definida como (donde V es el volumen molecular y S es la superficie) [3]:

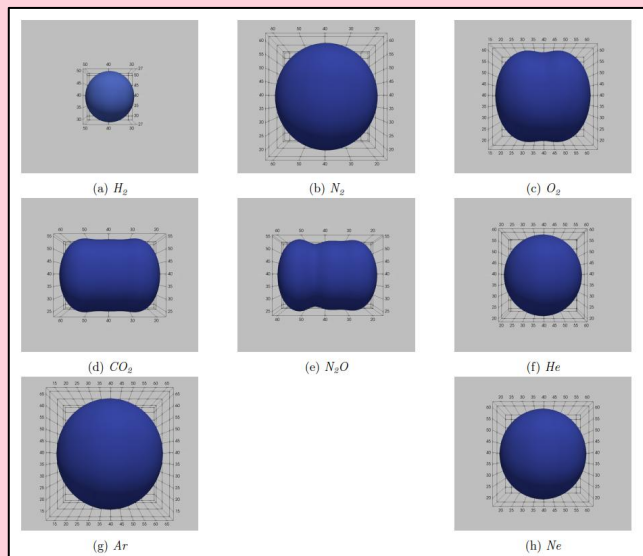
$$\Phi = \frac{(\pi \cdot (6 \cdot V)^2)^{1/3}}{S}$$

Debido a la alta esfericidad de los Gases Nobles no es posible obtener un resultado definitivo para ellos.



Obtención Geometría Molecular:

- Las siguientes moléculas fueron estudiadas:
 - ❖ N₂, H₂, O₂, CO₂, N₂O, Ar, He y Ne.
- La geometría molecular mediante la teoría de funcionales de densidad (DFT).
 - ❖ Cada funcional puede resultar en resultados distintos [2].
- Funcionales Utilizados:
 - ❖ LDA, GGA, Funcionales híbridos y Hartree-Fock.



Conclusiones:

- Uso de extensión de Lorentz-Lorenz para describir las no idealidades del modelo.
- Relación entre el “Shape Factor” con la geometría molecular.
- Definición de *Asfericidad Molecular*.
- Corrección geométrica explica una parte significativa del comportamiento no ideal observado en el índice de refracción.

Referencias:

- [1] Moltó, S. et al., 2023. A parametric methodology for the assignment of pressure values versus refractive measurement. <https://doi.org/10.21014/tc16-2022.036>.
- [2] Burke, K., Wagner, L.O., 2013. DFT in a nutshell. <https://doi.org/10.1002/qua.24259>.
- [3] Moltó, S. et al., 2026. Realistic foundations for improving the accuracy in refractometry based on an extension of the Lorentz-Lorenz relation. *Under Review*.