

La ecuación de fuerza de la mecánica cuántica.

por

M. W. Evans,

Civil List

y

Colegio de Graduados,

Universidad de Gales,

(www.webarchive.org.uk, www.aias.us, www.atomicprecision.com, www.upitec.org,
www.et3m.net)

y

H. Eckardt

AIAS. y UPITEC

(www.aias.us, www.upitec.org)

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net)

Resumen.

La ecuación de fuerza de la mecánica cuántica se deduce utilizando el hecho de que las variables canónicas q y p de las ecuaciones clásicas de Hamilton son independientes. Esto permite el cálculo directo de fuerzas por primera vez en la mecánica cuántica, utilizando las funciones de onda de Schroedinger. Se presentan algunos ejemplos de eigenvalores de fuerza para soluciones exactas de la ecuación de Schroedinger, la cual es una ecuación de energía pura deducida a partir del hamiltoniano clásico. Este nuevo método de cálculo de fuerzas tiene esencialmente una utilidad ilimitada a través de toda la ciencia cuántica.

Palabras clave: Teoría ECE, ecuación cuántica de fuerza, ecuaciones de Hamilton.

1. Introducción.

Durante el desarrollo de la teoría del campo unificado ECE a lo largo de 177 documentos a la fecha [1-10] se ha deducido a partir de la geometría de Cartan la ecuación de Schroedinger de la mecánica cuántica, dentro del contexto de una teoría del campo unificado. La estructura lógica suministrada por la teoría ECE ha permitido la reducción de las ecuaciones cuánticas de Hamilton en el documento UFT 176 (www.aias.us).

En la Sección 2 se deduce una nueva ecuación de fuerza para la mecánica cuántica utilizando el hecho de que las variables canónicas q y p de las ecuaciones de movimiento de Hamilton son independientes. Este hecho permite la deducción de la ecuación de fuerza a partir de la ecuación de Schroedinger, de manera que las funciones de onda de Schroedinger pueden utilizarse directamente para el cálculo de los eigenvalores de fuerza de la mecánica cuántica. La ecuación de fuerza de la mecánica cuántica posee una utilidad ilimitada a lo largo y ancho de toda la ciencia cuántica, siendo de una importancia tan fundamental como las ecuaciones de fuerza de la mecánica clásica.

En la Sección 3, se utiliza álgebra computacional para verificar los cálculos manuales realizados en la Sección 2 y para generar tablas de eigenvalores de fuerza para soluciones exactas bien conocidas [11, 12] de la ecuación de Schroedinger. La existencia de una fuerza puramente cuántica se publica por primera vez en problemas tales como la partícula en una esfera. La ecuación de fuerza puede aplicarse en química cuántica computacional para investigar fuerzas intra e inter moleculares, así como fuerzas de torsión de utilidad en simulación dinámica molecular.

2. La ecuación de fuerza y algunos eigenvalores de fuerza.

Consideremos el hamiltoniano clásico:

$$H = T + V \quad (1)$$

donde T es la energía cinética y V es la energía potencial. Puede expresarse como:

$$H = E \quad (2)$$

donde E denota la energía total. Las variables canónicas de Hamilton son q y p , y son variables independientes:

$$\frac{dp}{dq} = 0 \quad (3)$$

Si elegimos, por simple argumento, a q como a x en una dimensión, entonces:

$$\frac{dp}{dx} = 0 \quad (4)$$

La energía cinética es:

$$T = \frac{p^2}{m} \quad (5)$$

de manera que se deduce a partir de la independencia de entre x y p que:

$$\frac{dT}{dx} = 0 \quad (6)$$

Por lo tanto:

$$\frac{dH}{dx} = \frac{dV}{dx} \quad (7)$$

Consideremos el axioma de Schroedinger:

$$\hat{p} \psi = -i \hbar \frac{d\psi}{dx} \quad (8)$$

en donde p es un operador actuando sobre la función ψ , conocida como la función de onda de la mecánica cuántica. Aquí, \hbar es la constante reducida de Planck. Se deduce que la energía cinética en la mecánica cuántica deviene un operador:

$$\hat{T} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (9)$$

y el hamiltoniano deviene la ecuación de Schroedinger:

$$\hat{H} \psi = (\hat{T} + V) \psi = E \psi \quad (10)$$

Ahora diferenciamos ambos lados de la Ec. (10):

$$\frac{d}{dx} (\hat{H} \psi) = \frac{d}{dx} (E \psi) \quad (11)$$

Resulta entonces que:

$$\frac{d}{dx} (\hat{H} \psi) = E \frac{d\psi}{dx} \quad (12)$$

porque los eigenvalores de la energía E son independientes de x . Por lo tanto:

$$\left(\frac{d\hat{H}}{dx}\right) \psi + \hat{H} \frac{d\psi}{dx} = E \frac{d\psi}{dx} \quad (13)$$

A partir de la independencia de x y p en las ecuaciones de Hamilton, resulta que:

$$\left(\frac{d\hat{H}}{dx}\right)\psi = \left(\frac{dV}{dx}\right)\psi \quad (14)$$

a partir de la Ec.(7). La fuerza se define como:

$$F = -\frac{dV}{dx} \quad (15)$$

Por lo tanto la ecuación de fuerza de la mecánica cuántica se deduce a partir de las ecuaciones de Hamilton:

$$\boxed{(\hat{H} - E) \frac{d\psi}{dx} = F \psi} \quad (16)$$

Esto constituye un nuevo resultado de un nivel ilimitado de utilidad a lo largo de toda la ciencia cuántica.

En la Ec.(16) el operador de Hamilton:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \quad (17)$$

actúa sobre la derivada de la función de onda de Schroedinger, o en general sobre la derivada de una función de onda de la mecánica cuántica obtenida de cualquier manera, por ejemplo en química cuántica computacional. La ecuación cuántica de Hamilton deducida en el documento UFT 176 es:

$$i \hbar \frac{d}{dx} \langle \hat{H} \rangle = \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle \quad (18)$$

donde:

$$\langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = i \hbar \frac{dV}{dx} \quad (19)$$

de manera que se encuentra, consistentemente, que:

$$\frac{d}{dx} \langle \hat{H} \rangle = \frac{dH}{dx} = \frac{dV}{dx} = -F = -\frac{dp}{dt} \quad (20)$$

El resultado fundamental de la independencia de x y p en la ecuación de Hamilton significa que:

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = 0 \quad (21)$$

de manera que resulta:

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \int \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} d\tau = 0 . \quad (22)$$

En la Ec.(18):

$$\frac{d}{dx} \langle \hat{H} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \int \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} d\tau + \int \psi^* \hat{x} \frac{dV}{dx} d\tau = \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle = \frac{dV}{dx} . \quad (23)$$

Por lo tanto, en general:

$$\left\langle \frac{d\hat{H}}{dx} \right\rangle = \int \psi^* \hat{x} \frac{d\hat{H}}{dx} \psi d\tau \quad (24)$$

y a partir de la Ec.(13) resulta que:

$$\left\langle \frac{d\hat{H}}{dx} \right\rangle = \frac{d\langle \hat{H} \rangle}{dx} \quad (25)$$

tal como se utilizó en el documento UFT 176. Este resultado significa que:

$$\begin{aligned} \int \psi^* \frac{d\hat{H}}{dx} \psi d\tau &= \int \psi^* \frac{dV}{dx} \psi d\tau \\ &= \frac{dV}{dx} = \frac{d\langle \hat{H} \rangle}{dx} = -F . \end{aligned} \quad (26)$$

La Ec. (16) puede utilizarse para hallar eigenvalores de fuerza para soluciones exactas de la ecuación de Schroedinger. Hasta donde hemos podido investigar mediante una búsqueda en la literatura, este procedimiento nunca se ha llevado a cabo a la fecha en mecánica cuántica, y proporciona información fundamental de una utilidad ilimitada. El resto de esta sección proporciona ejemplos sencillos, al alcance de un cálculo manual, en tanto que en la Sección 3 se presentan tablas de eigenvalores de fuerza a partir de álgebra computacional.

La función de onda de orden cero del oscilador armónico [11, 12] es:

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) \quad (27)$$

donde x es el desplazamiento, m es masa y ω es la frecuencia angular de oscilación. Por lo tanto:

$$\hat{H} \frac{d\psi_0}{dx} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \frac{d\psi_0}{dx} . \quad (28)$$

Los niveles de energía para el oscilador armónico son [11, 12]:

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (29)$$

y el nivel de energía de orden cero viene dado por:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (30)$$

De manera que el eigenvalor de fuerza de orden cero es:

$$F_0 = -m \omega^2 x \quad (31)$$

Sucede que este resultado es el mismo que se obtiene en el caso clásico. Demuestra que la bien conocida energía de orden cero, o energía “del vacío” (22) se ve acompañada por una hasta ahora desconocida fuerza de orden cero (23). Es probable que esta fuerza se relacione con la fuerza de Casimir, una bien conocida corrección radiativa.

La función de onda de primer orden del oscilador armónico es [11, 12]:

$$\psi_1 = A x \exp \left(-\alpha \frac{x^2}{2} \right) \quad (32)$$

donde:

$$A = \left(\frac{4\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \alpha^{1/2}, \quad \alpha = \frac{m\omega}{\hbar} \quad (33)$$

y el nivel de energía de primer orden es:

$$E = \frac{3}{2} \hbar \omega, \quad n = 1, \quad (34)$$

de manera que, a partir de la Ec. (16), el eigenvalor de fuerza de primer orden es:

$$F_1 = -kx \quad (35)$$

donde es bien conocido que la constante de la ley de Hooke es:

$$k = m\omega^2 \quad (36)$$

A través de álgebra computacional se encuentra que todos los eigenvalores de fuerza para el oscilador armónico son iguales a los eigenvalores de orden cero y de primer orden. Existe una fuerza de orden cero que no existe en la física clásica, y ésta es la primera ocasión en que se reporta su existencia. Evidentemente, estos eigenvalores de fuerza están todos cuantizados; en el caso del oscilador armónico sucede que son iguales al resultado clásico para todas las funciones de onda.

El método puede extenderse al orbital 1s del átomo de hidrógeno, cuya función de onda adopta el formato:

$$\psi_{10} = e^{-r/a} \quad (37)$$

donde A es una constante. En este caso, el operador hamiltoniano es:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(r) \quad (38)$$

donde el potencial es una atracción coulombica entre el protón y el electrón del átomo de hidrógeno, junto con una fuerza centrífuga de repulsión, y donde l es el número cuántico del momento angular:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (39)$$

donde ϵ_0 es la permitividad expresada en unidades del S.I. y donde e es la carga del protón [11, 12]. Los niveles de energía del átomo de hidrógeno [11, 12] son:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2 n^2} \quad (40)$$

donde n es el número cuántico principal y donde a es el radio de Bohr. Para el orbital 1s:

$$n = 1 \quad (41)$$

de manera que:

$$E_{10} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (42)$$

De manera que la Ec. (16) da el resultado:

$$F_{10} = 0 \quad (43)$$

El eigenvalor de fuerza en el orbital 1s es igual a cero. Esto constituye una explicación de la estabilidad de la orbital 1s. No hay otra forma de explicar esta estabilidad en la mecánica cuántica convencional [11, 12] porque el orbital 1s no posee momento angular y el punto más probable [11] donde se encuentre el electrón del orbital 1s es el núcleo. La explicación correcta de la estabilidad del orbital 1s es que la fuerza coulombica clásica de atracción se ve equilibrada exactamente por una fuerza cuántica desconocida hasta el momento, de manera que la fuerza neta resultante es igual a cero.

La parte radial del orbital $2p_z$ del átomo de hidrógeno es [11, 12]:

$$\psi_{21} = A r e^{-r/2a} \quad (44)$$

y el nivel de energía es:

$$E_{21} = -\frac{\hbar^2}{8ma^2} \quad (45)$$

de manera que la Ec.(16) da:

$$F_{21} = F_{21} = -\frac{\hbar^2(r-2a)}{2amr^3} \quad (46)$$

En este caso hay una fuerza neta sobre el electrón $2p_z$ debido a la parte radial de su función de onda completa. Esta última es un producto de la función radial (36) y un armónico esférico, como es bien conocido. Los eigenvalores la fuerza para el átomo de hidrógeno se discuten en detalle en la Sección 3.

Para una rotación en un plano con un valor constante de r (la partícula en un anillo [11]), la Ec.(16) deviene:

$$(\hat{H} - E)\left(\frac{d\Psi}{dx} + \frac{d\Psi}{dy}\right) = F\Psi \quad (47)$$

y el operador hamiltoniano es:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \quad (48)$$

En coordenadas cilíndricas:

$$\frac{df}{dx} = \cos\varphi \frac{df}{dr} - \frac{\text{sen}\varphi}{r} \frac{df}{d\varphi} \quad (49)$$

$$\frac{df}{dy} = \text{sen}\varphi \frac{df}{dr} + \frac{\cos\varphi}{r} \frac{df}{d\varphi} \quad (50)$$

y si r es constante:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \quad (51)$$

Utilizando los resultados:

$$\frac{df}{dx} + \frac{df}{dy} = \frac{1}{r} (\cos\varphi - \text{sen}\varphi) \frac{df}{d\varphi} \quad (52)$$

y:

$$\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \frac{\partial^3 f}{\partial y^3} = \frac{1}{r} (\cos\varphi - \text{sen}\varphi) \frac{df}{d\varphi} \quad (53)$$

se encuentra que:

$$\hat{H} \left(\frac{d\psi}{dx} + \frac{d\psi}{dy} \right) = - \frac{\hbar^2}{2mr^3} (\cos\varphi - \text{sen}\varphi) \frac{\partial^3 \psi}{\partial \varphi^3} \quad , \quad (54)$$

$$-E \left(\frac{d\psi}{dx} + \frac{d\psi}{dy} \right) = \frac{-E}{r} (\cos\varphi - \text{sen}\varphi) \frac{d\psi}{d\varphi} \quad . \quad (55)$$

La función de onda en general es:

$$\psi = A \exp (i m_j \varphi) + B \exp (- i m_j \varphi) \quad (56)$$

con niveles de energía:

$$E = \frac{\hbar^2 m_j^2}{2mr^2} \quad , \quad (57)$$

de manera que se encuentra que:

$$F = 0$$

para todos los números cuánticos m_j . En este caso todos los eigenvalores de fuerza son iguales a cero.

Finalmente, para una rotación tridimensional (la partícula en una esfera), la ecuación cuántica de fuerza deviene:

$$(\hat{H} - E) \nabla \psi = F \psi \quad (58)$$

donde, en coordenadas esféricas polares:

$$\nabla \psi = \frac{d\psi}{dr} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{d\psi}{d\theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{1}{r \sin\theta} \frac{d\psi}{d\varphi} \mathbf{e}_\varphi \quad . \quad (59)$$

No hay potencial clásico V , de manera que el operador hamiltoniano es:

$$\hat{H} = - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] \quad . \quad (60)$$

Los niveles de energía son:

$$E = \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) \quad (61)$$

donde l es el número cuántico del momento angular [11, 12] y mr^2 es el momento de inercia. Hay dos números cuánticos, l y m , y las funciones de onda son los armónicos esféricos [11, 12]:

$$\psi = Y_{lm} \quad (62)$$

En el caso más sencillo:

$$\psi_{00} = \frac{1}{2\pi^{1/2}} \quad (63)$$

de manera que:

$$F_{00} = 0 \quad (64)$$

En este caso no hay eigenvalor de fuerza. En segundo lugar, consideremos como ejemplo:

$$\psi_{10} = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \quad (65)$$

Por lo tanto:

$$\nabla \psi_{10} = \frac{1}{r} \frac{d\psi_{10}}{d\theta} \mathbf{e}_\theta = -\frac{A}{r} \sin \theta \mathbf{e}_\theta \quad (66)$$

y:

$$\hat{H} (\nabla \psi_{10}) = -\frac{\hbar^2}{2mr^3} \left(\frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \psi_{10}}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^3 \psi_{10}}{\partial \theta^3} \right) \mathbf{e}_\theta \quad (67)$$

$$= \frac{A \hbar^2}{2mr^3} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \sin \theta \right) \mathbf{e}_\theta \quad (68)$$

con:

$$E \nabla \psi_{10} = -\frac{A \hbar^2}{mr^3} \sin \theta \mathbf{e}_\theta \quad (69)$$

De manera que:

$$\begin{aligned} (\hat{H} - E) \nabla \psi_{10} &= \mathbf{F} \psi_{10} = \frac{A \hbar^2}{2mr^3} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + 3 \sin \theta \right) \mathbf{e}_\theta \\ &= A \cos \theta \mathbf{e}_\theta \end{aligned} \quad (70)$$

y hay un eigenvalor de fuerza distinto de cero:

$$F_{10} = \frac{\hbar^2}{2mr^3} \left(\frac{\cos \theta}{\sin \theta} + 3 \sin \theta \right) . \quad (71)$$

Este es un eigenvalor de fuerza puramente cuántico, desconocido hasta la fecha para la partícula en una esfera. No hay potencial ni fuerza clásica.

3. Evaluación de eigenvalores de fuerza por álgebra computacional.

En la sección anterior se han evaluado algunos ejemplos de eigenvalores de fuerza. A continuación incluimos una visión más completa obtenida mediante álgebra computacional, de manera de evitar cálculos manuales, los cuales resultan más complicados y proclives a la aparición de errores.

3.1 Oscilador armónico.

Los eigenvalores de energía del oscilador armónico de mecánica cuántica vienen dados por la Ec. (29).

El hamiltoniano es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (72)$$

Los primeros cuatro eigenvalores, como vienen dados en [11] se han evaluado mediante la aplicación de la Ec. (16). El resultado es el mismo que para el eigenvalor de orden cero en todos los casos, véase la Tabla 1. Obviamente, este resultado es independiente del número cuántico n .

n	E	F
0	$\frac{1}{2} \hbar \omega$	$-m\omega^2 x$
1	$\frac{3}{2} \hbar \omega$	$-m\omega^2 x$
2	$\frac{5}{2} \hbar \omega$	$-m\omega^2 x$
3	$\frac{7}{2} \hbar \omega$	$-m\omega^2 x$

Tabla 1. Eigenvalores de energía y fuerza para el oscilador armónico.

3.2 Partícula en un anillo.

Para una partícula que se mueve en un anillo (es decir un círculo con un radio fijo) el hamiltoniano en coordenadas esféricas según las Ecs. (48, 51) es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (73)$$

Para un eigenvalor del tipo (56) con niveles de energía (57) que dependen del número cuántico angular m_j . Tal como se afirmó en la sección 2, desaparecen todos los eigenvalores de fuerza. En este caso la fuerza es de hecho un brazo de palanca (torque) que es en general igual a cero (Tabla 2). Un brazo de palanca distinto de cero requiere de un movimiento tridimensional.

Número cuántico	E	F
m_j	$\frac{\hbar^2}{2mr^2} m_j^2$	0

Tabla 2. Eigenvalores de energía y fuerza para una partícula en un anillo.

3.3 Armónicos esféricos.

El operador de Hamilton para armónicos esféricos en coordenadas polares esféricas (θ, ϕ) es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{(\sin \theta)^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (74)$$

Dado que éste es un problema bidimensional, debemos de considerar separadamente los componentes θ y ϕ . Con los eigenvalores de energía de la Ec. (61) y los eigenvalores dados en [11] los resultados de la componente ϕ de fuerza (más precisamente: brazo de palanca) vienen dados en la Tabla 3. Los números cuánticos de momento angular son l y m . Para estados con $l = 0$ no hay brazo de palanca, indicando una vez más la estabilidad de la función $1s$ del hidrógeno. Las componentes ϕ de fuerza dependen del ángulo θ . En las Figs. 1-5 se han representado para algunos números cuánticos, junto con las funciones de onda correspondientes. Hay polos en la fuerza, pero solo para valores angulares en los que las funciones de onda son iguales a cero. Esto inhibe la divergencia para los valores esperados de fuerza.

l	m	E	F_ϕ
0	0	0	0
1	0	$\frac{\hbar^2}{mr^2}$	0
1	1	$\frac{\hbar^2}{mr^2}$	$\frac{i\hbar^2(2(\cos\theta)^2 - 1)}{2mr^3(\sin\theta)^3}$
2	0	$\frac{3\hbar^2}{mr^2}$	0
2	1	$\frac{3\hbar^2}{mr^2}$	$\frac{i\hbar^2(4(\cos\theta)^2 - 3)}{2mr^3(\sin\theta)^3}$
2	2	$\frac{3\hbar^2}{mr^2}$	$\frac{i\hbar^2(4(\cos\theta)^2 - 3)}{mr^3(\sin\theta)^3}$

Tabla 3. Eigenvalores de energía y fuerza para el oscilador armónico, componente ϕ .

Las componentes θ de fuerza son distintas de cero con excepción del estado con $l = m = 0$, véase la Tabla 4. Las representaciones en las Figs. 6-10 muestran las mismas características que par alas componentes ϕ , sin embargo la fuerza cambia de signo para $\theta = \frac{\pi}{2}$ en todos los casos. Esto pareciera ser una propiedad geométrica básica. Dado que las funciones de onda poseen valores complejos, se han representado gráficamente sus valores absolutos.

l	m	E	F_θ
0	0	0	0
1	0	$\frac{\hbar^2}{mr^2}$	$\frac{\hbar^2}{2mr^3 \cos\theta \sin\theta}$
1	1	$\frac{\hbar^2}{mr^2}$	$\frac{\hbar^2 \cos\theta}{2mr^3(\sin\theta)^3}$
2	0	$\frac{3\hbar^2}{mr^2}$	$\frac{3\hbar^2 \cos\theta}{3mr^3(\sin\theta)^3 - 2mr^3 \sin\theta}$
2	1	$\frac{3\hbar^2}{mr^2}$	$\frac{\hbar^2}{2mr^3 \cos\theta (\sin\theta)^3}$
2	2	$\frac{3\hbar^2}{mr^2}$	$\frac{3\hbar^2 \cos\theta}{mr^3(\sin\theta)^3}$

Tabla 4. Eigenvalores de energía y fuerza para el oscilador armónico, componente θ .

3.3 Funciones radiales del hidrógeno.

Los eigenvalores de fuerza más interesantes ciertamente son aquellos del átomo de hidrógeno. El hamiltoniano viene dado por la Ec. (38) con el potencial (39) el cual consiste de la parte coulombica y el así llamado potencial de momento angular repulsivo. Los eigenvalores de energía solo dependen del número cuántico principal n tal como viene dado en la Ec. (40). Las funciones de onda radiales se extrajeron nuevamente de [11]. Los eigenvalores resultantes de fuerza se incluyen en la lista de la Fig. 5 para los primeros orbitales s, p y d. Todos los eigenvalores son distintos y no hay fuerza para el estado 1s, como ya se ha notado en la sección 2 de este documento.

n	l	E	F
1	0	$-\frac{\hbar^2}{2ma^2}$	0
2	0	$-\frac{\hbar^2}{8ma^2}$	$\frac{\hbar^2}{mar^2}$
2	1	$-\frac{\hbar^2}{8ma^2}$	$\frac{r \hbar^2 - 2a \hbar^2}{2mar^3}$
3	0	$-\frac{\hbar^2}{18ma^2}$	$\frac{10 r^2 \hbar^2 - 114 a r \hbar^2 + 243 a^2 \hbar^2}{6 m a r^4 - 54 m a^2 r^3 + 81 m a^3 r^2}$
3	1	$-\frac{\hbar^2}{18ma^2}$	$\frac{4 r^2 \hbar^2 - 36 a r \hbar^2 + 54 a^2 \hbar^2}{3 m a r^4 - 18 m a^2 r^3}$
3	2	$-\frac{\hbar^2}{18ma^2}$	$\frac{2 r \hbar^2 - 12 a \hbar^2}{3mar^3}$

Tabla 5. Eigenvalores de energía y fuerza para funciones de onda radiales del átomo de hidrógeno.

Las funciones de onda de fuerza y radiales se representan gráficamente en las Figs. 11-16. Hay algunos polos en la fuerza en donde la función de onda cruza el valor de cero, similar al caso de los armónicos esféricos. El estado 2s es atractivo cerca del núcleo, mientras que el estado 3s no lo es. En algunos casos hay cruzamientos del valor cero de la fuerza donde la función de onda posee un valor mínimo o máximo. Esto podría significar que la carga de desplaza a lugares con densidad de alta probabilidad. Para moléculas, esto podría relacionarse con el hecho que el mismo tipo de orbitales pueden ser de unión o anti-unión, según cual fuere la simetría. Los eigenvalores de fuerza tienen el potencial para dar nuevos descubrimientos en el campo de las uniones químicas y mecanismos de estabilidad.

Finalmente – aún cuando F es un eigenvalor y no un operador – podría tener sentido computar el valor esperado de F con las funciones de onda:

$$\langle F \rangle = \int_0^\infty \psi^* F \psi r^2 dr. \quad (75)$$

Esto da los resultados listados en la Tabla 6 (en unidades atómicas). Dado que la integración

radial se pondera mediante el factor r^2 , el comportamiento de F cerca de $r = 0$ no desempeña un papel de importancia. Los resultados se incluyen en la Tabla 6 y presentan el sorprendente resultado de que sólo los estados 2s y 3s producen una fuerza neta. Esto no significa que no haya otras fuerzas presentes, las cuales serían brazos de palanca del comportamiento angular.

n	l	$\langle F \rangle$
1	0	0
2	0	$-\frac{1}{4}$
2	1	0
3	0	$-\frac{2}{9}$
3	1	0
3	2	0

Tabla 6. Valores esperados de fuerza para el átomo de hidrógeno.

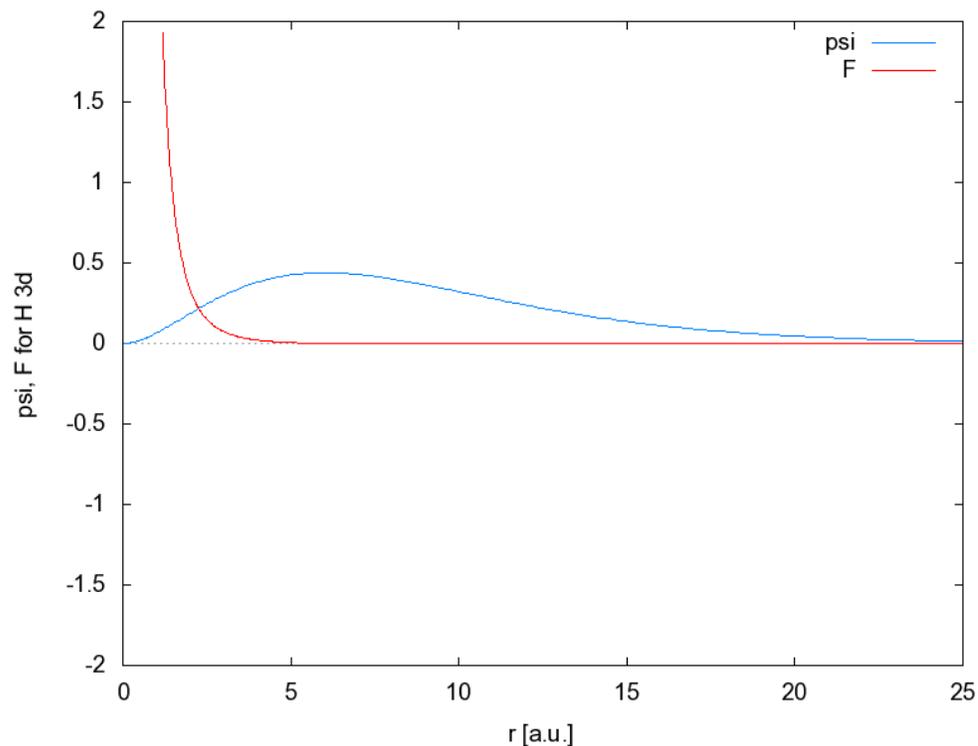


Fig. 1. Componentes ϕ de la función de onda y fuerza para armónicos esféricos, $l=1$, $m=0$.

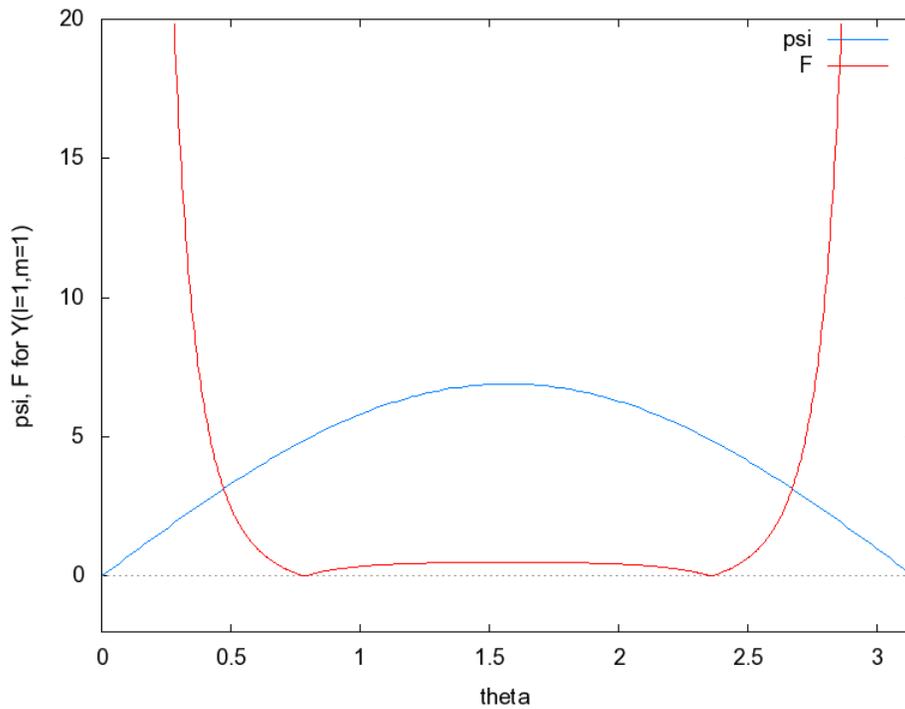


Fig. 2. Componentes ϕ de función de onda y fuerza para armónicos esféricos, $l=1$, $m=1$.

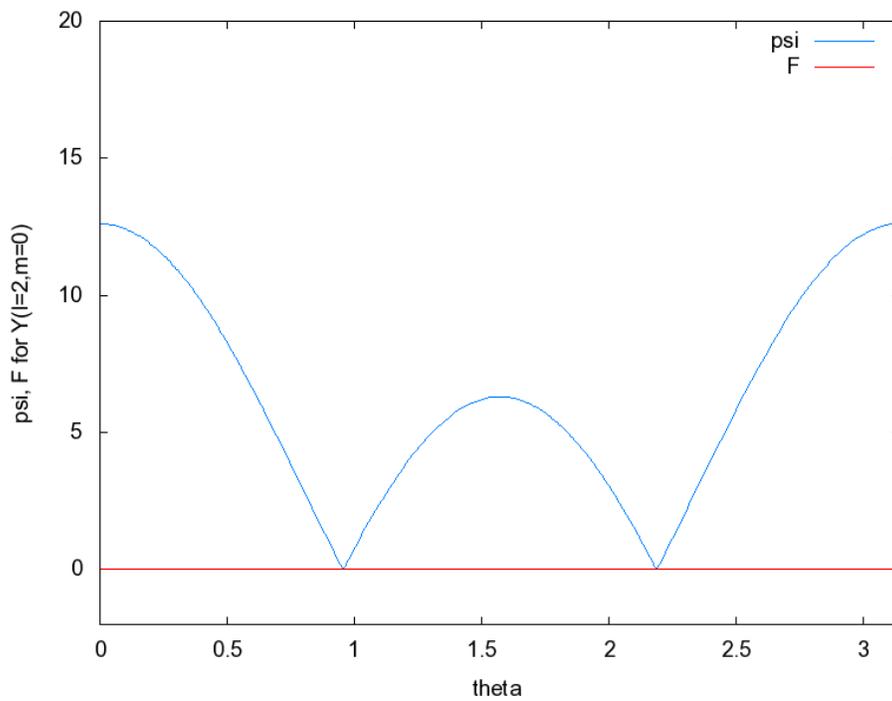


Fig. 3. Componentes ϕ de función de onda y fuerza para armónicos esféricos, $l=2$, $m=0$.

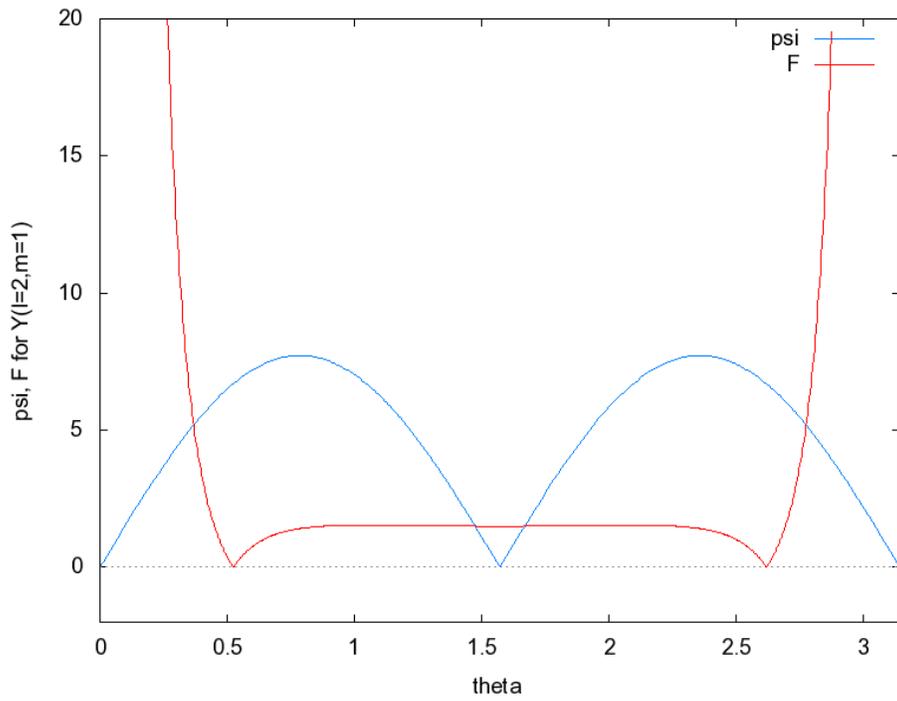


Fig. 4. Componentes ϕ de función de onda y fuerza para armónicos esféricos, $l=2$, $m=1$.

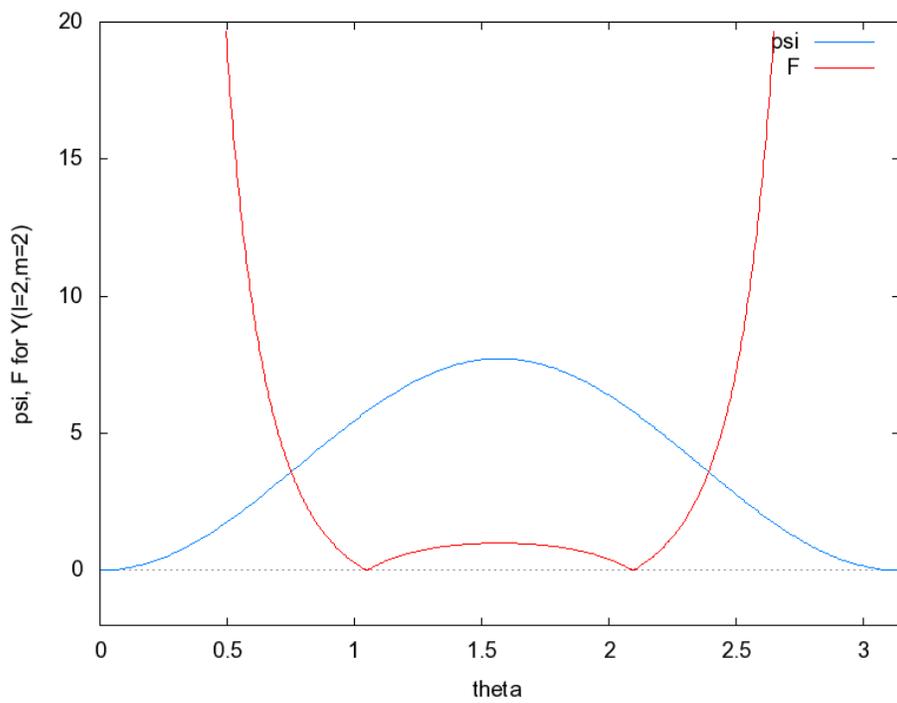


Fig. 5. Componentes ϕ de función de onda y fuerza para armónicos esféricos, $l=2$, $m=2$.

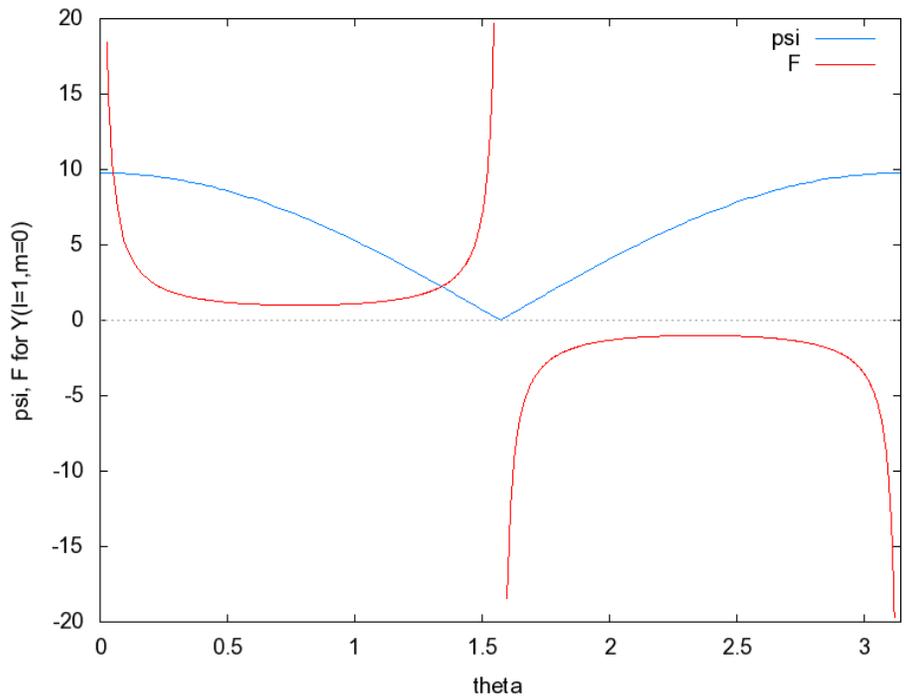


Fig. 6. Componentes θ de función de onda y fuerza para armónicos esféricos, $l=1$, $m=0$.

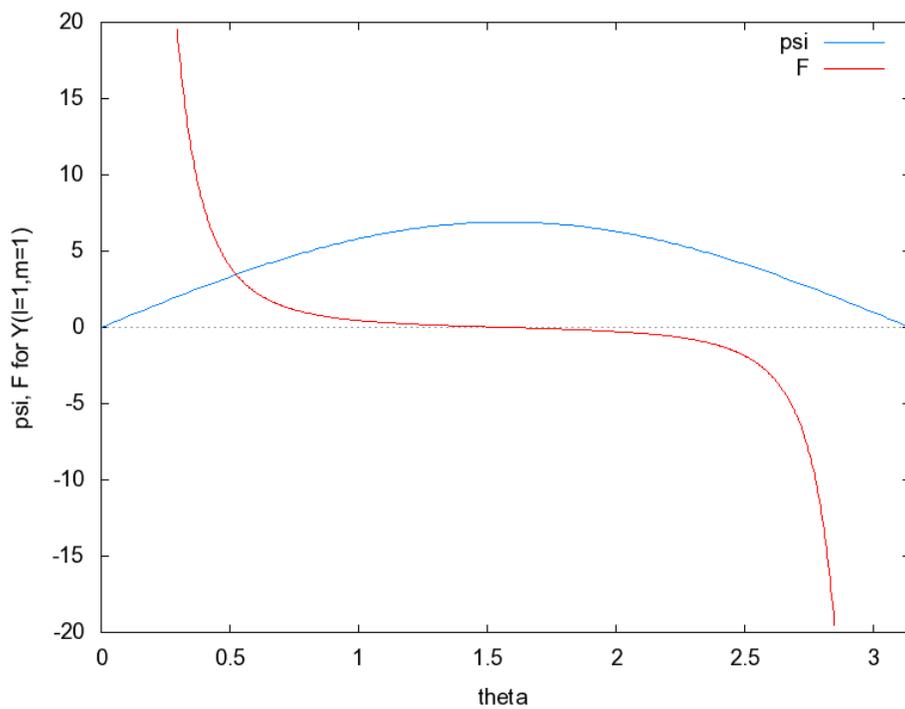


Fig. 7. Componentes θ de función de onda y fuerza para armónicos esféricos, $l=1$, $m=1$.

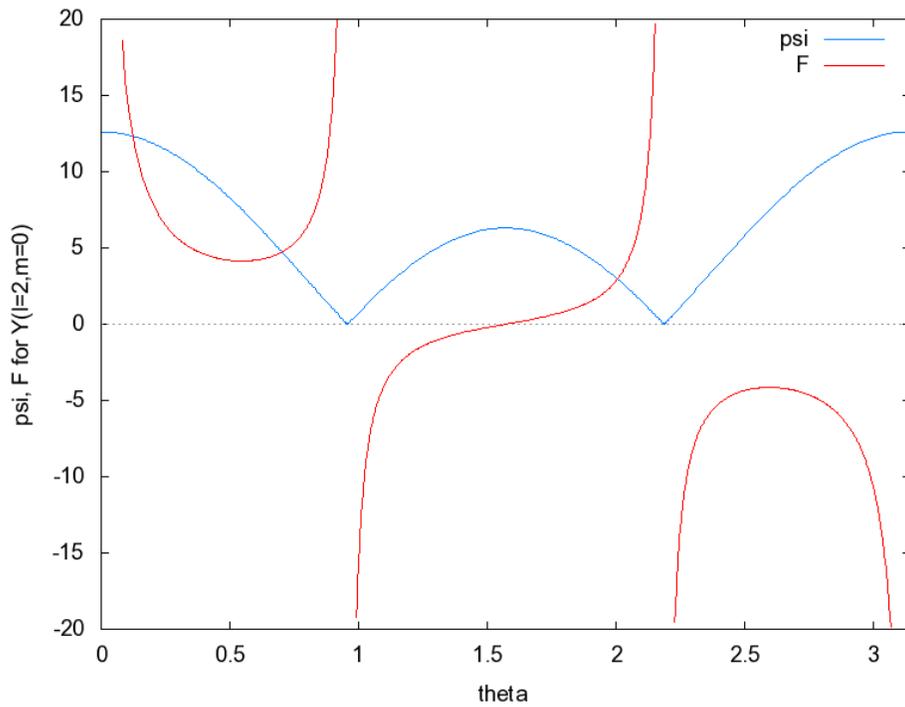


Fig. 8. Componentes θ de función de onda y fuerza para armónicos esféricos, $l=2$, $m=0$.

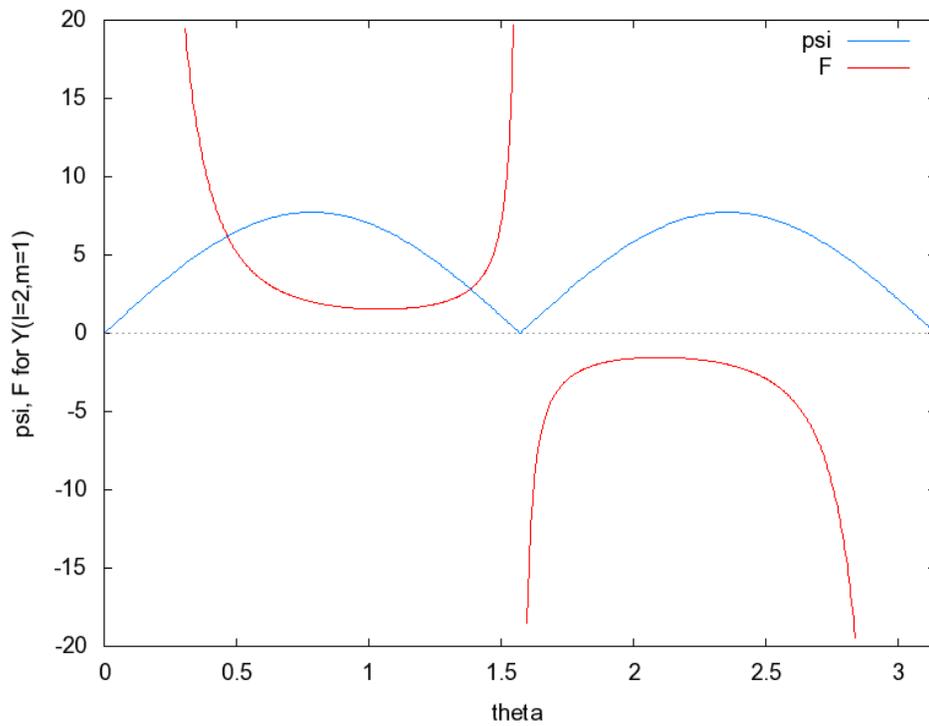


Fig. 9. Componentes θ de función de onda y fuerza para armónicos esféricos, $l=2$, $m=1$.

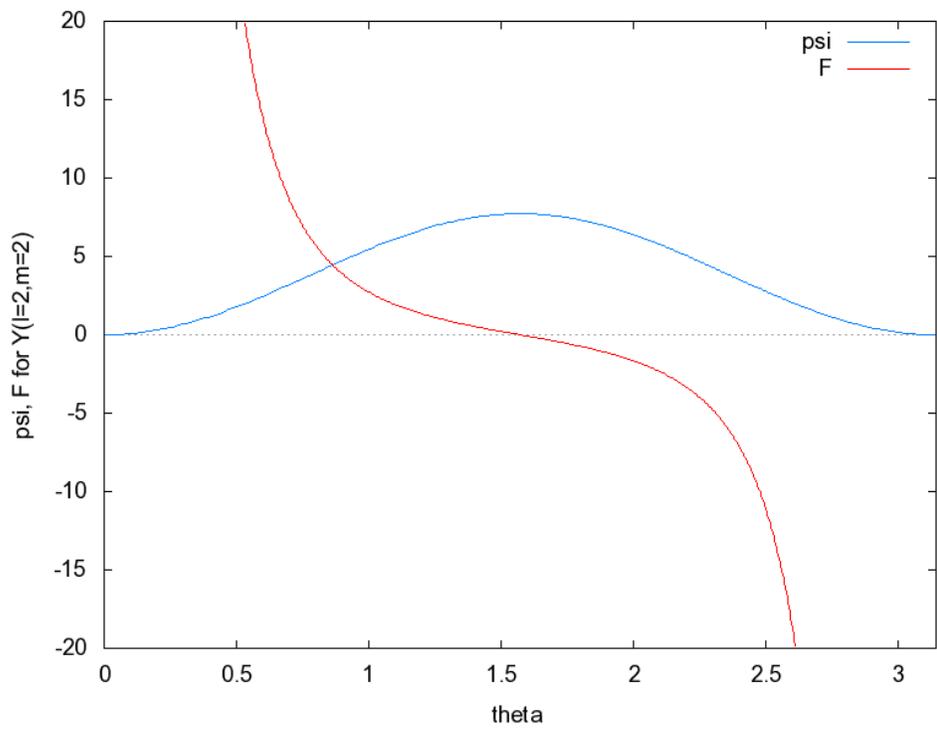


Fig. 10. Componentes θ de función de onda y fuerza para armónicos esféricos, $l=2$, $m=2$.

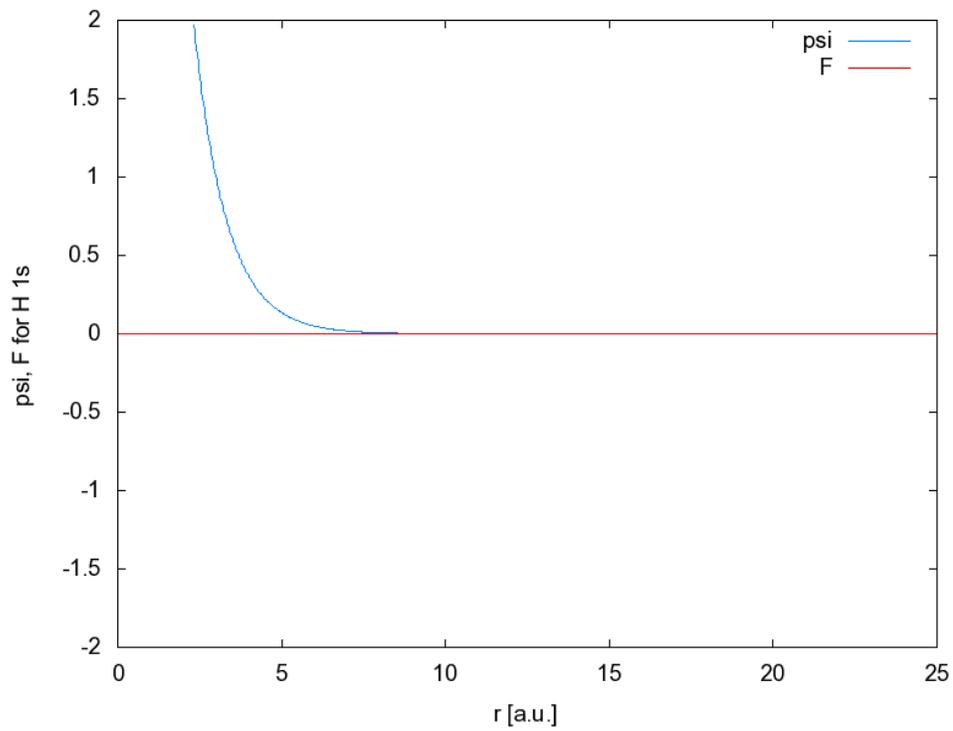


Fig. 11. Función de onda radial y fuerza para H 1s.

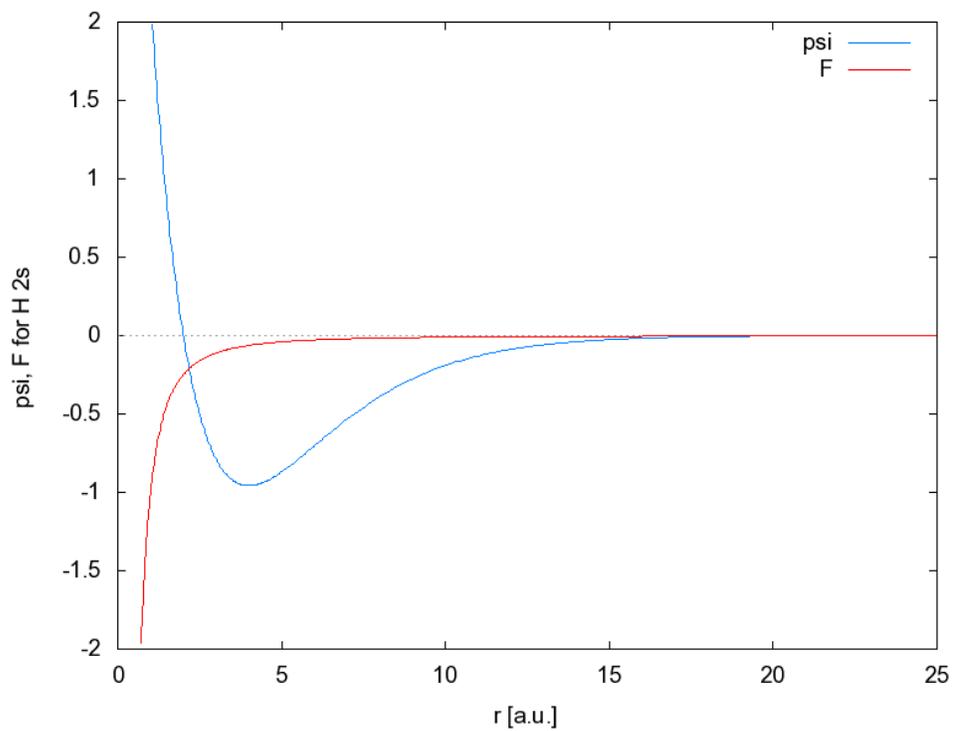


Fig. 12. Función de onda radial y fuerza para H 2s.

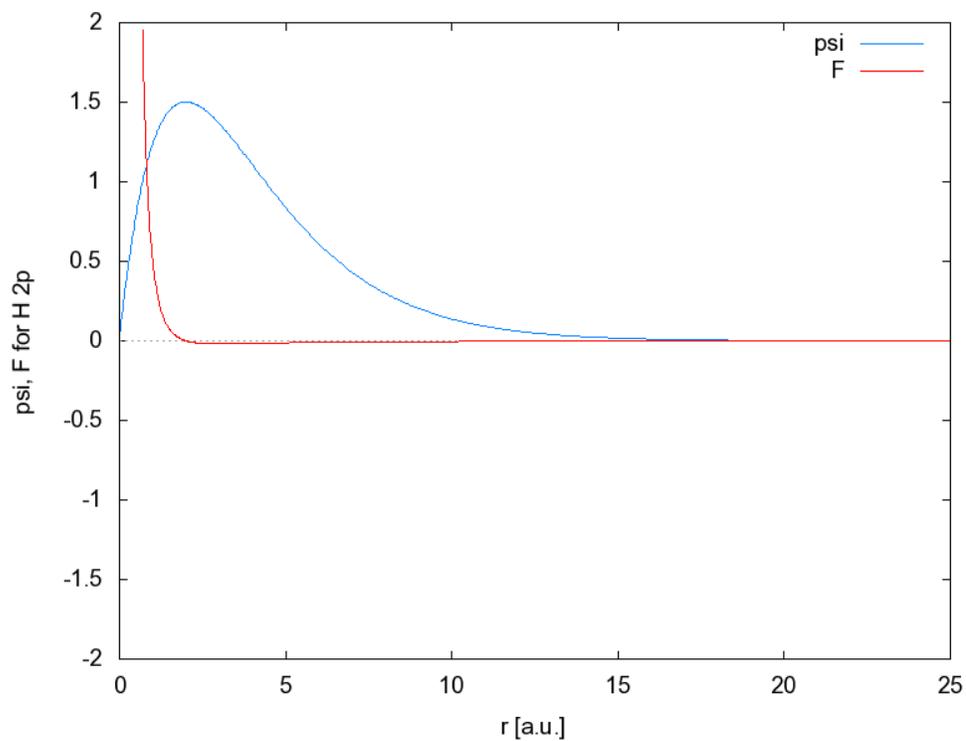


Fig. 13. Función de onda radial y fuerza para H 2p.

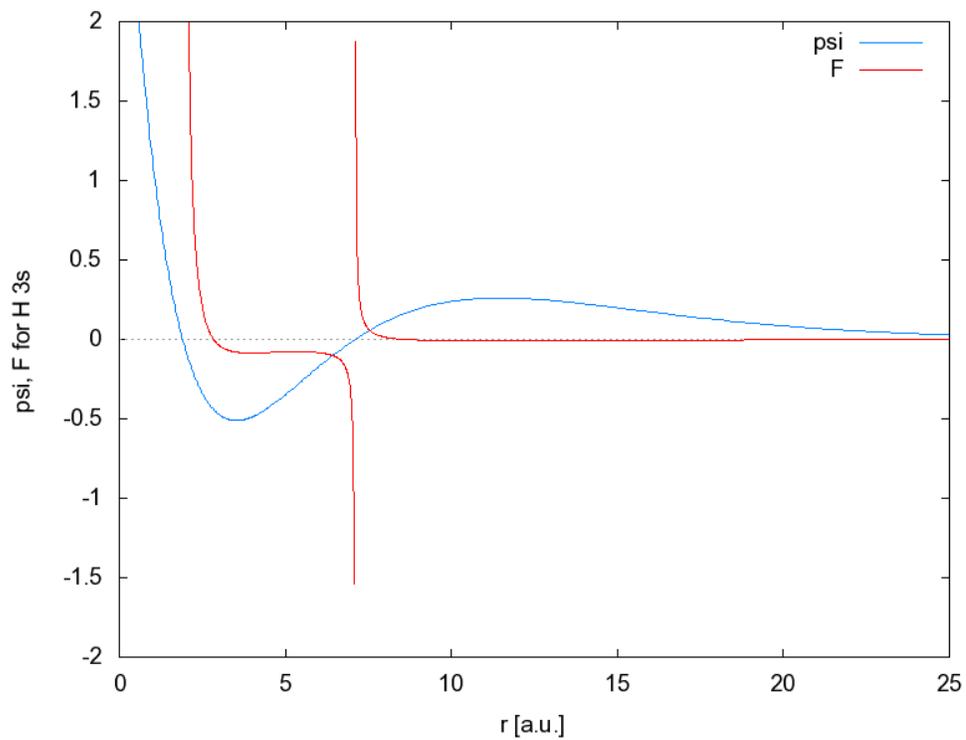


Fig. 14. Función de onda radial y fuerza para H 3s.

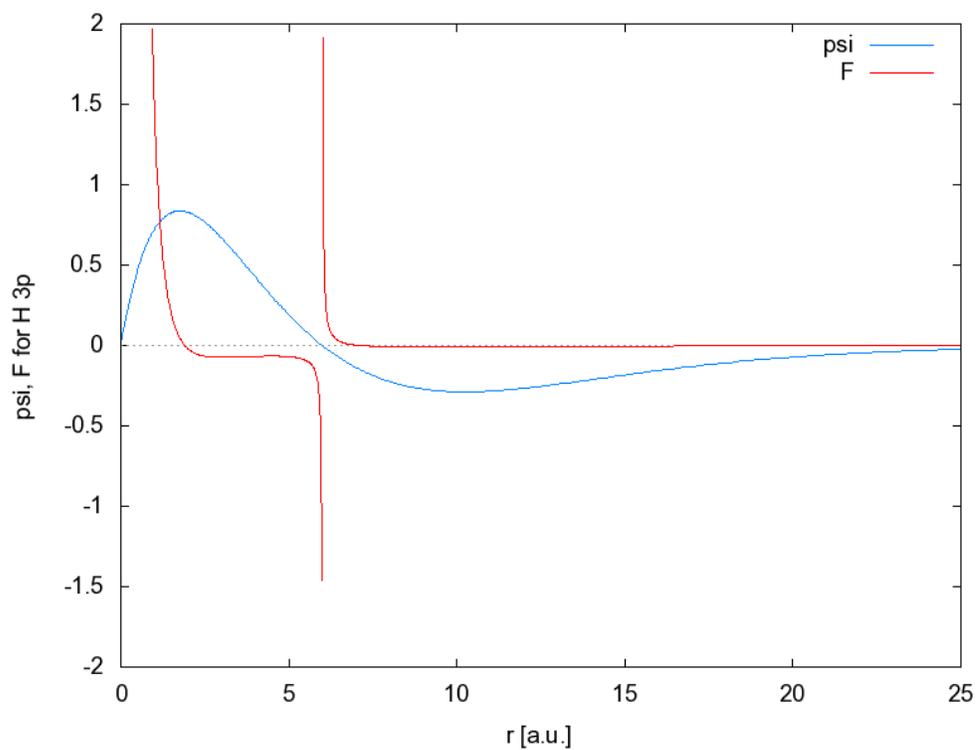


Fig. 15. Función de onda radial y fuerza para H 3p.

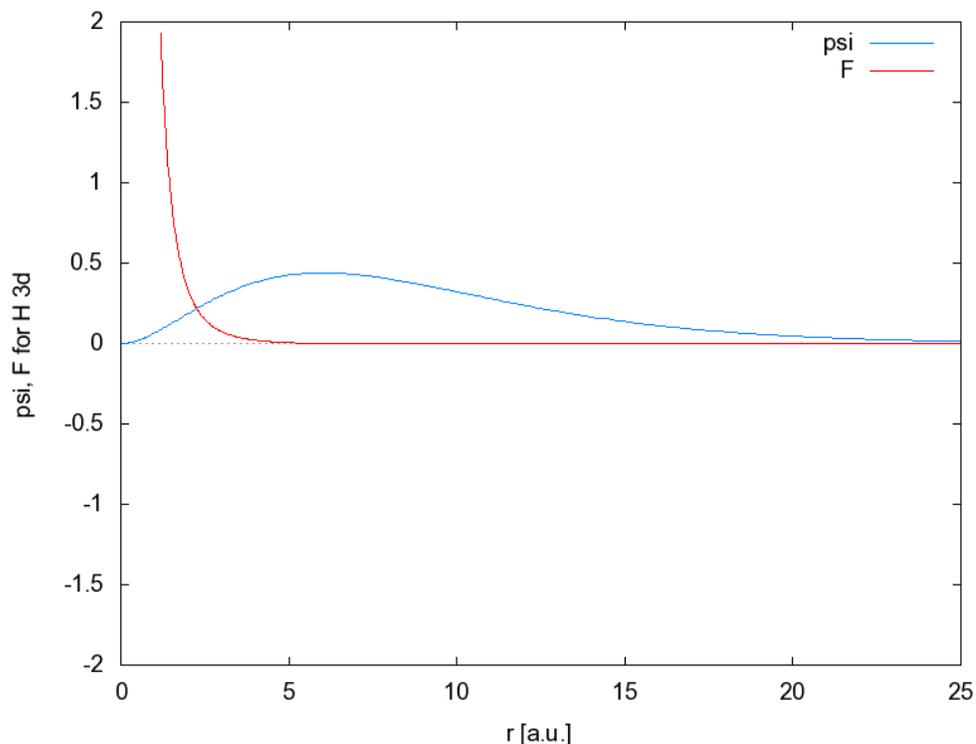


Fig. 16. Función de onda radial y fuerza para H 3d.

Agradecimientos.

Se agradece el Gobierno Británico por la Pensión Civil Vitalicia y otros altos honores, y al grupo técnico de AIAS por muchas discusiones interesantes. Se agradece a Alex Hill por un preciso y voluntario tipografiado y las traducciones, a David Burleigh por su publicación voluntaria y a Simon Clifford por su ayuda voluntaria en las grabaciones.

Referencias.

- [1] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, “Generally Covariant Unified Field Theory” (Abramis 2005 en adelante), en siete volúmenes a la fecha.
- [2] M. W. Evans, S. Crothers, H. Eckardt y K. Pendergast, “Criticisms of the Einstein Field Equation” (Cambridge International Science Publishing, 2011).
- [3] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, “ECE Theory Applied to H Bonding”

(Academia de Ciencias de Serbia, 2010).

[4] Kerry Pendergast, “The Life of Myron Evans” (Cambridge International Science Publishing, 2011).

[5] Las fuentes abiertas de la teoría ECE: www.webarchive.org.uk, www.aias.us, www.atomicprecision.com, www.upitec.org, www.et3m.net.

[6] M. W. Evans et al., www.aias.us, Omnia Opera y documentos UFT.

[7] M. W. Evans y H. Eckardt, “The Fermion Equation” (Cambridge International Science Publishing, en prep.).

[8] M. W. Evans y S. Kielich, eds., “Modern Non-linear Optics” (Wiley, primera y segunda ediciones, 1992, 1993, 1997, 2001), en seis volúmenes

[9] M. W. Evans y L. B. Crowell, “Classical and Quantum Electrodynamics and the B(3) Field” (World Scientific, 2001).

[10] M. W. Evans y J.-P. Vigié, “The Enigmatic Photon” (Kluwer, 1994 a 2002), en diez volúmenes, en encuadernación de tapa dura y blanda.

[11] P. W. Atkins, “Molecular Quantum Mechanics” (Oxford Univ. Press, 2a ed., 1983).

[12] E. Merzbacher, “Quantum Mechanics” (Wiley, 1970, 2a ed.)