Una Nueva Ecuación de Schroedinger a partir de la teoría orbital tridimensional.

por

M .W. Evans y H. Eckardt,

Civil List, AIAS y UPITEC

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

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net)

Resumen.

Se utiliza la teoría de órbitas tridimensionales para desarrollar un nuevo tipo de ecuación de Schroedinger, la cual caracteriza la física y química cuántica computacional de un modo completamente novedoso. La nueva ecuación de Schroedinger se obtiene a partir del equivalente de la sección cónica *beta* del hamiltoniano clásico de la teoría orbital tridimensional en la que la energía cinética se describe mediante coordenadas polares esféricas.

Palabras clave: teoría ECE, teoría orbital en 3D, nueva ecuación de Schroedinger.

1. Introducción.

Recientemente, en esta serie de doscientos setenta y siete documentos a la fecha, se ha demostrado que la teoría orbital es, en general, tridimensional [1-10], requiriendo del uso de coordenadas polares esféricas en la energía cinética del hamiltoniano clásico. El resultado principal de la teoría orbital tridimensional es que la precesión del perihelio puede describirse clásicamente sin recurrir a la relatividad. Se ha demostrado que el hamiltoniano clásico es exactamente equivalente a las secciones cónicas tridimensionales, las cuales poseen propiedades mucho más ricas que las secciones cónicas planas de la teoría orbital bidimensional, que fue el antecedente durante 400 años. En la Sección 2, las secciones cónicas tridimensionales se utilizan para deducir una nueva ecuación de Schroedinger para la física y química cuántica computacional. Es ésta una nueva ecuación fundamental que puede aplicarse a cualquier situación para la cual pudiera emplearse la ecuación de Schroedinger tradicional, de manera que posee un potencial de aplicabilidad muy amplio. En la Sección 3 se incluyen algunos comentarios acerca de los métodos numéricos que probablemente se requieran para resolver la nueva ecuación de Schroedinger. Este documento debiera de leerse en conjunción con las notas de acompañamiento 277(1) a 277(4) ubicadas en el portal www.aias.us, y en las que se incluyen más detalles.

2. La Nueva Ecuación de Schroedinger.

Consideremos al hamiltoniano clásico de la teoría orbital tridimensional:

$$H = E = \frac{p^2}{2m} + U(r) \tag{1}$$

donde:

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\beta}^2 \right) \tag{2}$$

y

$$U(r) = -\frac{k}{r}. \tag{3}$$

En estas ecuaciones, una masa *m* gira en órbita alrededor de una masa *M*. El potencial de atracción (3) da una conocida ley de atracción del cuadrado de la inversa. El momento $\underline{p}$ y la velocidad $\underline{v}$ se define mediante:

$$v^2 = \dot{r}^2 + r^2 \dot{\beta}^2 \tag{4}$$

donde $\underline{r}$ es la distancia entre *m* y *M*, y donde

$$k = mMG \tag{5}$$

donde G es la constante de Newton. El ángulo β se define en términos del sistema de coordenadas polares esféricas (r, θ, φ) mediante:

$$\dot{\beta}^2 = \dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \operatorname{sen}^2\theta . \tag{6}$$

Este hamiltoniano puede transferirse directamente a la teoría atómica y molecular si redefinimos k como:

$$k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \tag{7}$$

donde e es la carga del protón y donde ε_0 es la permitividad en el vacío en unidades del S. I.

La condición de cuantización es:

$$-i\hbar \underline{\nabla} \psi = \underline{p} \psi \tag{8}$$

donde $\hbar$ es la constante reducida de Planck y ψ es la función de onda. De manera que la ecuación de Schroedinger es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = (E - U)\psi = T\psi = \frac{1}{2} m \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\beta}^2 \right) \psi \tag{9}$$

donde T es la energía cinética y donde E es la energía total. Por lo tanto, la ecuación de Schroedinger es la conocida ecuación:

$$\hat{H} \psi = E \psi \tag{10}$$

donde $\hat{H}$ es el operador hamiltoniano.

Se ha demostrado en documentos inmediatamente precedentes de esta serie [1-10] que el hamiltoniano clásico (1) es rigurosamente equivalente a las secciones cónicas tridimensionales:

$$r = \frac{\alpha}{1 + \epsilon \cos\beta} \tag{11}$$

donde α es la semi latitud recta y ε es la excentricidad. Éstas se definen mediante :

$$\alpha = \frac{L^2}{mk} \tag{12}$$

y

$$\epsilon^2 = 1 + 2\frac{EL^2}{mk^2} \tag{13}$$

donde L es la magnitud del momento angular total. A partir de un análisis lagrangiano, L es una constante de movimiento:

$$L = mr^2\dot{\beta} = mr^2\frac{d\beta}{dt} \tag{14}$$

y es una cantidad conservativa. La otra cantidad conservativa es la energía total E. Utilizando:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\beta}\frac{d\beta}{dt} \tag{15}$$

la energía cinética puede expresarse como:

$$T = \frac{L^2}{2mr^4}\left(\left(\frac{dr}{d\beta}\right)^2 + r^2\right) \tag{16}$$

donde:

$$\frac{dr}{d\beta} = -\frac{\epsilon r^2}{\alpha}\,\mathrm{sen}\,\beta \tag{17}$$

a partir de la Ec. (11). Se deduce a partir de lo anterior que la energía cinética es:

$$T = \frac{1}{2}\frac{L^2}{m\alpha^2}\left(1+\epsilon^2+2\epsilon\cos\beta\right). \tag{18}$$

Las Ecs. (9) y (18) brindan una formulación totalmente novedosa de la ecuación de Schroedinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = (E-U)\psi = \frac{L^2}{2m\alpha^2}\left(1+\epsilon^2+2\epsilon\cos\beta\right)\psi \tag{19}$$

y una nueva física y química cuántica computacional.

En átomos y moléculas:

$$\alpha = \frac{L^2}{mk} = \frac{4\pi\epsilon_0 L^2}{me^2} \tag{20}$$

y ejemplos particulares de la Ec. (19) pueden analizarse como sigue. La partícula sobre una esfera viene dada por:

$$U = 0\,,\quad \epsilon = 0\,,\quad \alpha = r \tag{21}$$

de manera que la Ec. (19) se reduce a:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi = \frac{L^2}{2m\alpha^2}\psi \tag{22}$$

la cual puede expresarse como:

$$-\frac{\hbar^2}{r^2}\Lambda^2\psi = \frac{L^2}{\alpha^2}\psi \tag{23}$$

donde Λ^2 es el lagrangiano. Este último opera en el armónico esférico *Y* como sigue:

$$\Lambda^2 Y = -l(l+1)Y. \tag{24}$$

Utilizando:

$$r = \alpha \tag{25}$$

y

$$\Lambda^2\psi = -l(l+1)\psi \tag{26}$$

resulta entonces que:

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 \tag{27}$$

que es la conocida expresión para el cuadrado del momento angular orbital en teoría cuántica.

Por lo tanto, la partícula en una esfera se genera a partir de la sección cónica esférica en la que desaparece la elipticidad. No hay energía potencial en la partícula en una esfera. Se trata de un ejercicio hipotético que muestra el origen de la Ec. (27) en secciones cónicas tridimensionales.

El átomo de Bohr se genera mediante:

$$\epsilon = 0, \quad U = -\frac{k}{r} \tag{28}$$

y, por lo tanto, se genera a partir de la sección cónica esférica con la ley de Coulomb actuando entre protón y electrón. En el átomo de Bohr:

$$\alpha = r \tag{29}$$

y la cuantización de Bohr es:

$$L = n\hbar \tag{30}$$

donde *n* es el número cuántico de Bohr. Esto se relaciona con la cuantización de Schroedinger a través de:

$$n^2 = l(l+1). \tag{31}$$

En general, La Ec. (19) es:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi &= (E-U)\psi \\ &= \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2L^2}\left(1+\epsilon^2+2\epsilon\cos\beta\right)\psi \end{aligned} \tag{32}$$

Por lo tanto, los niveles de energía del átomo de hidrógeno vienen dados por:

$$\hat{H}\psi = E\psi = \left[\frac{me^4\left(1+\epsilon^2+2\epsilon\cos\beta\right)}{32\pi^2\epsilon_0^2L^2} - \frac{k}{r}\right]\psi \tag{33}$$

Se deduce entonces que:

$$\left\langle \frac{me^4\left(1+\epsilon+2\epsilon\cos\beta\right)}{32\pi^2\epsilon_0^2L^2} \right\rangle = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2n^2} \tag{34}$$

donde n en la Ec. (34) indica el número cuántico principal. Por lo tanto:

$$\langle L^2 \rangle = \frac{n^2 \hbar^2}{1 + \epsilon^2 + 2\epsilon \cos\beta} \tag{35}$$

y cuando:

$$\epsilon = 0 \tag{36}$$

la Ec. (35) se reduce a la cuantización de Bohr:

$$\langle L^2 \rangle = n^2 \hbar^2 \tag{37}$$

de manera que el número cuántico principal n puede identificarse en este límite con el número cuántico de Bohr. Inversamente, la cuantización de Bohr se generaliza a la Ec. (35), la cual es una expresión totalmente novedosa de la ecuación de Schroedinger.

En general, la nueva física y química cuántica computacional se caracteriza por el valor esperado:

$$\langle \cos\beta \rangle = \int \psi^* \cos\beta \, \psi \, d\tau \tag{38}$$

donde

$$\cos\beta = \frac{\cos\varphi}{\left(\cos^2\varphi + \left(\frac{L}{L_z}\right)^2 \operatorname{sen}^2\varphi\right)^{1/2}} = \left(1 - \left(\frac{1}{1 - \left(\frac{L_z}{L}\right)^2}\right)\cos^2\theta\right)^{1/2} \tag{39}$$

Aquí, L_z es la componente de L según el eje Z. Se requiere de métodos numéricos para evaluar estos valores esperados, y este tema se comenta con más detalle en la Sección 3.

3. Métodos numéricos.

Por el Dr. Horst Eckardt.

Agradecimientos.

Se agradece al Gobierno Británico por la Pensión Civil Vitalicia y al equipo técnico de AIAS y otros por muchas discusiones interesantes. Se agradece a Dave Burleigh por las publicaciones en red, a Alex Hill por las traducciones y grabaciones en idioma castellano y a Robert Cheshire por las grabaciones en idioma inglés.

Referencias bibliográficas.

[1] M .W. Evans, H. Eckardt, D. W. Lindstrom y S. J. Crothers, "Principles of ECE Theory" (de libre acceso en el portal www.aias.us y en formato de libro).

[2] M. W. Evans, Ed., J. Found. Phys. Chem (de libre acceso en el portal www.aias.us y publicado por Cambridge International Science Publishing, CISP, www.cisp-publishing.com , 2011).

[3] M. W. Evans, Ed. "Definitive Refutations of the Einstein General Relativity" (de libre acceso en el portal www.aias.us y publicado por CISP, 2012).

[4] M .W. Evans, S. J. Crothers, H. Eckardt y K. Pendergast, "Criticisms of the Einstein Field Equation" (de libre acceso en el portal www.aias.us , CEFE, y publicado por CISP, 2011).

[5] M .W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, "Generally Covariant Unified Field Theory" (de libre acceso en el portal www.aias.us y publicado por Abramis, 2005 a 2011), en siete volúmenes.

[6] L. Felker, "The Evans Equations of Unified Field Theory" (de libre acceso en el portal www.aias.us y publicado por Abramis 2007, de libre acceso en la traducción al idioma castellano por Alex Hill en el portal www.aias.us).

[7] M. W. Evans and L. B. Crowell, "Classical and Quantum Electrodynamics and the B(3) Field" (open source on www.aias.us y publicado por World Scientific, 2001).

[8] M. W. Evans y S. Kielich, Eds., "Modern Nonlinear Optics" (Wiley Interscience, Nueva York, 1992, 1993, 1997, y 2001) en dos ediciones y seis volúmenes.

[9] M .W. Evans y J. - P. Vigier, The Enigmatic Photon (de libre acceso en el portal www.aias.us y publicado por Kluwer, 1994 a 2002) en 10 volúmenes con encuadernación dura y blanda.

[10] M . W. Evans y A. A. Hasanein, "The Photomagneton in Quantum Field Theory" (World Scientific, 1994).