

Funciones de onda atómicas y moleculares en presencia de la gravitación.

por

M .W. Evans y H. Eckardt,
Civil List, AIAS y UPITEC ,

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

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net)

Resumen.

Se muestra que los niveles de energía del átomo de hidrógeno (H) se desplazan por una cantidad constante debido a la interacción gravitacional entre el protón y la masa de la Tierra. El efecto es de alrededor de 1% de la interacción en próstica entre el protón y el electrón. Este desplazamiento constante no tiene efecto sobre el espectro atómico del átomo de hidrógeno, porque el espectro se debe a transiciones en las cuales el término gravitacional se cancela. Sin embargo, la gravitación produce un conjunto de novedosas funciones de onda que pueden utilizarse para caracterizar cualquier átomo o molécula, o cualquier elemento material, introduciendo así una nueva rama de la química cuántica computacional.

Palabras clave: teoría ECE en el límite cuántico no relativista, funciones de onda novedosas en presencia de la gravitación.

1. Introducción.

En documentos recientes de esta serie [1-10] se ha demostrado que la teoría cuántica de Planck / Einstein / de Broglie (la "antigua teoría cuántica") predice los desplazamientos descubiertos experimentalmente por Evans y Morris. Estos últimos son cambios de color producidos por una muestra en absorción o emisión, y se describen con amplios detalles en el diario o blog del portal de www.aias.us. De manera que los desplazamientos o corrimientos de Evans / Morris proporcionan una nueva y severa prueba para la teoría cuántica. Durante la investigación de las transiciones de Balmer para $n = 2$ a $n = 3$ del hidrógeno atómico, se encontró que la degeneración de energía se veía elevada por los efectos de Evans / Morris, de manera que la línea única de absorción se partía en varias líneas de diferentes frecuencias. De manera que resulta de interés el tratar de investigar experimentalmente estos corrimientos con una alta precisión. Como consecuencia de esta interesante partición del espectro del hidrógeno atómico, la Sección 2 investiga el efecto de la gravitación sobre el átomo de hidrógeno, en primer instancia el efecto del campo gravitacional de la Tierra. Como de costumbre, este documento debiera de leerse conjuntamente con sus notas de acompañamiento, publicadas bajo el título de UFT305 en el portal de www.aias.us. La Sección 3 ofrece una comparación gráfica directa de las funciones de onda radiales afectadas por la gravitación en comparación con las funciones de onda radiales tradicionales del átomo de hidrógeno. Las funciones de onda afectadas por la gravitación son completamente novedosas en el campo de la ciencia, a pesar de ser un producto de la ecuación de Schroedinger desarrollada en la década de 1920.

2. Funciones de Onda Radiales afectadas por la Gravitación.

La ecuación de Schroedinger, en presencia del campo gravitacional terrestre, es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V_1 \right) \psi = E \psi \quad (1)$$

donde

$$V_1 = -\frac{m_2 M G}{R} \quad (2)$$

es el potencial gravitacional entre el protón con una masa m_2 y la masa terrestre M . Aquí, R representa el radio terrestre y G es la constante de Newton. El efecto gravitacional sobre el electrón es mucho más pequeño porque la masa del electrón es mucho más pequeña que la del protón. En las notas de acompañamiento se muestra que el efecto gravitacional del electrón sobre el protón es completamente despreciable.

En la Ec. (1), m es la masa del electrón, una excelente aproximación a la masa reducida del electrón y del protón, e es la carga del protón, ϵ_0 es la permitividad en el vacío en unidades S.I., y r es la distancia entre el electrón y el protón. En la Ec. (1), ψ es la función de onda no relativista y E es la energía total. En el nivel clásico:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V_1 \quad (3)$$

donde H es el hamiltoniano y p es el momento lineal. La forma de transición de la Ec. (3) a la Ec. (1) se lleva a cabo con el postulado cuántico de Schroedinger:

$$P\psi = -i\hbar \nabla \psi. \quad (4)$$

El valor esperado la energía total se define a través del método de Born:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int \psi^* E \psi d\tau \\ &= \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V_1 \right) \psi d\tau \\ &= - \left(\frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \right) \frac{1}{n^2} - \frac{m_e M G}{R} \end{aligned} \quad (5)$$

en el cual la integración se lleva a cabo sobre el elemento de volumen $d\tau$.

La Ec. (5) significa que la interacción gravitacional entre el protón y la masa terrestre produce un corrimiento de alrededor de 1% en los conocidos niveles de energía del átomo de hidrógeno. De manera que esto corresponde a aquello que realmente se está observando en un laboratorio al nivel del mar. Este corrimiento depende de la altitud tal como se mire mediante R y en la masa M . En estrellas súper masivas de pequeño radio este corrimiento puede ser más grande. Sin embargo, no afecta el espectro atómico del hidrógeno porque dicho espectro depende de las transiciones entre n , por ejemplo la línea Balmer de $n=2$ a $n=3$ para el hidrógeno, estudiada en el documento UFT304. En estas transiciones, el potencial gravitacional es constante y se cancela. De manera que la gravitación no tiene efecto sobre el espectro atómico. Este resultado constituye una prueba para la teoría cuántica. Un espectro del hidrógeno atómico obtenido en un satélite debiera de ser el mismo espectro del hidrógeno atómico obtenido sobre la superficie terrestre. Sin embargo, el espectro del hidrógeno atómico se ve afectado por los corrimientos de fundamental importancia de Evans y Morris, de los cuales ahora se sabe que el corrimiento cosmológico hacia el color rojo constituye un ejemplo.

Sin embargo, la Ec. (1), brinda importante nueva información acerca del átomo de hidrógeno y, de hecho, de cualquier átomo o molécula sometido a un campo gravitacional. Esto puede demostrarse directamente de la siguiente manera.

Expresamos el término de potencial en la Ec. (1) como:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V_1 \quad (6)$$

definiendo así una nueva coordenada radial:

$$\frac{1}{r_1} = \frac{1}{r} + \chi \quad (7)$$

donde:

$$\chi = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \cdot \frac{m_Z M G}{R} = 4.5346 \times 10^8 \text{ m}^{-1} \quad (8)$$

utilizando la masa y el radio terrestres. Por lo tanto:

$$r_1 = \frac{r}{1 + \chi r} \quad (9)$$

Consideremos la ecuación de Schroedinger en el sistema de coordenadas (r_1, θ, φ) . Es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right) \psi_1 = E_1 \psi_1 \quad (10)$$

de manera que:

$$\langle E_1 \rangle = - \left(\frac{m e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \right)^{\frac{1}{n^2}} \quad (11)$$

Estos son los conocidos niveles de energía del átomo de hidrógeno, donde n es el número cuántico principal.

El empleo del sistema de coordenadas (r_1, θ, φ) produce los niveles de energía hidrogénicos (11) en presencia de un campo gravitacional. El efecto de la gravitación se ha incluido en el potencial electrostático definido mediante la Ec. (6).

Las funciones de onda de la Ec. (10) son:

$$\psi(r_1, \theta, \varphi) = R(r_1) Y(\theta, \varphi) \quad (12)$$

donde Y son los armónicos esféricos y donde las funciones de onda radiales son:

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2Z}{na}\right) \left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right] \int_0^l L_{n+l}^{2l+1}(s_1) \exp\left(-\frac{r_1}{2}\right) \quad (13)$$

Aquí, Z es el número atómico, y a es el radio de Bohr:

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 5.29177 \times 10^{-11} \text{ m} \quad (14)$$

y L representa los polinomios modificados de Laguerre. En la Ec. (13):

$$r_1 = \left(\frac{2Z}{na}\right) r. \quad (15)$$

Los valores esperados de energía en el sistema de coordenadas (r_1, θ, φ) se definen mediante:

$$\begin{aligned} \langle E_1 \rangle &= \int \psi_1^* E_1 \psi_1 d\tau \\ &= \int_{\psi=0}^{2\pi} \int_{\varphi=0}^{\pi} \int_{r_1=0}^{\infty} \psi_1^* E_1 \psi_1 r_1^2 \sin\theta dr_1 d\theta d\varphi. \end{aligned} \quad (16)$$

Por lo tanto, el efecto de la gravitación es la sustitución de r en la ecuación típica de Schroedinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) \psi = E \psi \quad (17)$$

por r_1 , definida por la Ec. (9). Este procedimiento da los mismos niveles de energía (11) tanto a partir de la Ec. (10) como de la Ec. (17), pero las funciones de onda (ψ_1) son diferentes. Son funciones de onda afectadas gravitacionalmente. Se expresan en términos de r_1 en la Ec. (13), pero pueden expresarse en términos de r utilizando la Ec. (9). Cuando se

expresan en términos de r , las funciones de onda afectadas gravitacionalmente pueden compararse con las funciones de onda radiales habituales $R_n(r)$ obtenidas a partir de la Ec. (17). Las funciones de onda habituales (o libres) del átomo de hidrógeno vienen dadas por la Ec. (13) donde r_1 se reemplaza con r . Las funciones de onda afectadas gravitacionalmente vienen dadas por la Ec. (13) con r_1 reemplazada por $r/(1+xr)$. En la Sección 3 se las compara directamente.

Este descubrimiento inicia un nuevo campo de investigación en la química cuántica computacional modificada por efectos gravitacionales, en la que las funciones de onda afectadas gravitacionalmente de cualquier átomo o molécula pueden computarse utilizando métodos numéricos altamente desarrollados así como paquetes codificados.

Las primeras funciones de onda radiales obtenidas a partir de la Ec. (10) son como sigue. En el átomo de hidrógeno el número atómico Z es igual a la unidad.

Para el orbital $1s$, $n = 1$, $l = 0$:

$$R_{10}(r) = \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \quad (18)$$

donde:

$$f_1 = \frac{2Z}{na} \left(\frac{r}{1+xr}\right) \quad (19)$$

Para el orbital $2s$, $n = 2$, $l = 0$:

$$R_{20}(r) = \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right) (2 - f_1) \exp\left(-\frac{f_1}{2}\right). \quad (20)$$

Para el orbital $2p$, $n = 2$, $l = 1$:

$$R_{21}(r) = \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{2\sqrt{6}}\right) f_1 \exp\left(-\frac{f_1}{2}\right). \quad (21)$$

Para el orbital $3s$, $n = 3$, $l = 0$:

$$R_{30}(r) = \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{9\sqrt{3}}\right) (6 - 6f_1 + f_1^2) \exp\left(-\frac{f_1}{2}\right). \quad (22)$$

Para el orbital $3p$, $n = 3$, $l = 1$:

$$R_{31}(r) = \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{9\sqrt{6}}\right) (4 - \rho_1) \rho_1 S_1 \exp\left(-\frac{\rho_1}{2}\right) \quad (23)$$

Para el orbital $3d$, $n = 3$, $l = 2$:

$$R_{32}(r) = \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{9\sqrt{30}}\right) \rho_1^2 \exp\left(-\frac{\rho_1}{2}\right) \quad (24)$$

3. Comparación Gráfica de Orbitales Radiales del H Libres y afectados por la Gravitación.

Las funciones de onda hidrogénicas (18-24) han sido calculadas con la coordenada ρ_1 definida en la Ec. (15), que contiene la corrección debida a los efectos gravitacionales. Por conveniencia utilizamos unidades atómicas en las que, por ejemplo, el radio de Bohr es igual a la unidad. Entonces, la Ec. (8) deviene

$$x = 4.53 \times 10^8 \text{ m}^{-1} = 0.024 \text{ u.a.} \quad (25)$$

La inversa de x es 41.7 radios de Bohr, lo cual se ubica sólo ligeramente por encima de las dimensiones atómicas. Por lo tanto, los efectos se vuelven claramente visibles en la gráfica de las funciones de onda. En las Figs. 1-3 se representan gráficamente las funciones de onda radiales $3s$, $3p$ y $3d$. Las funciones de onda sin distorsiones son aquellas para $x = 0$. La contribución del campo gravitacional del protón conduce a un ensanchamiento considerable de las funciones de onda ($x = 0.024$). Los otros dos ejemplos ($x = 0.07$, $x = 0.18$) conducen a un comportamiento cualitativamente diferente, donde no hay convergencia asintótica hacia la línea de cero, es decir que las funciones de onda no son normalizables y ya no constituyen soluciones válidas de la ecuación de Schrödinger. Aún para valores pequeños de x , la normalización debe de calcularse nuevamente. Esto solamente es posible numéricamente porque las integrales de normalización con r_1 no pueden resolverse analíticamente.

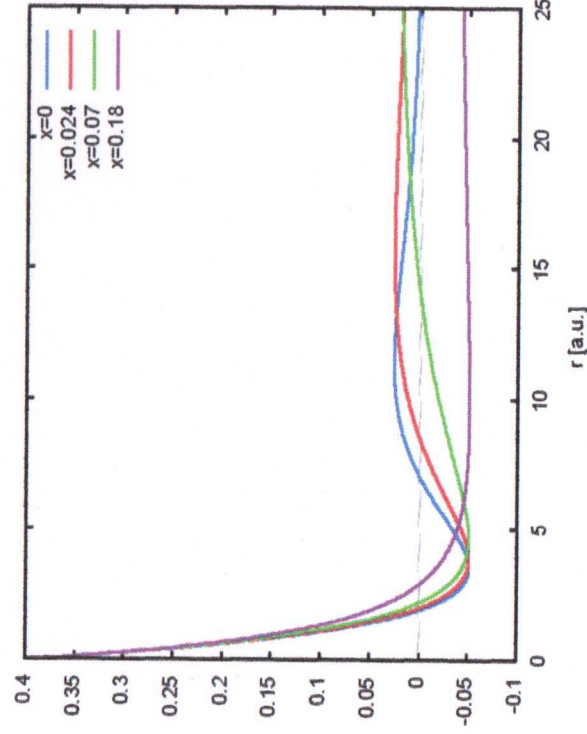


Figura 1: Función de onda hidrogénica con diferentes distorsiones gravitacionales x , estado $3s$.

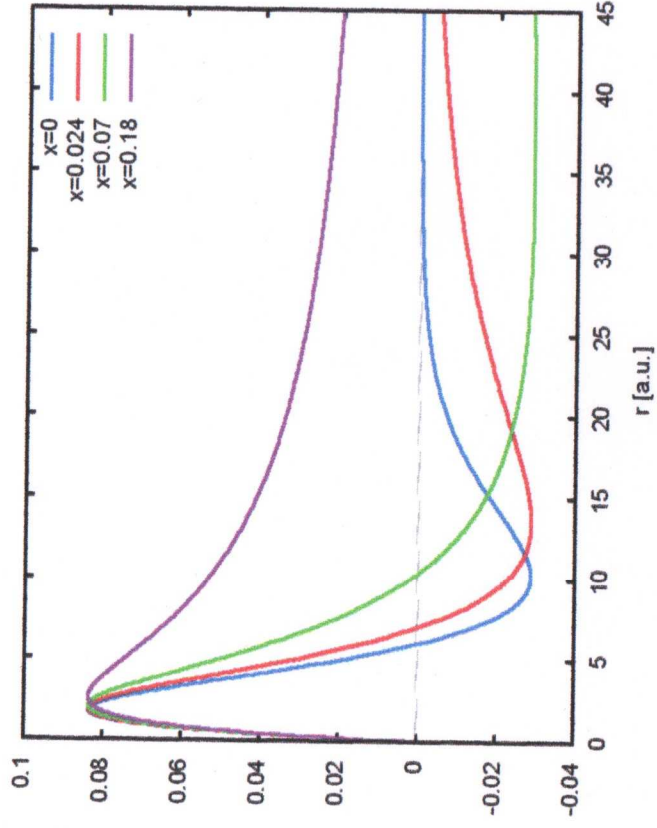


Figura 2: Función de onda hidrogénica con diferentes distorsiones gravitacionales x , estado $3p$.

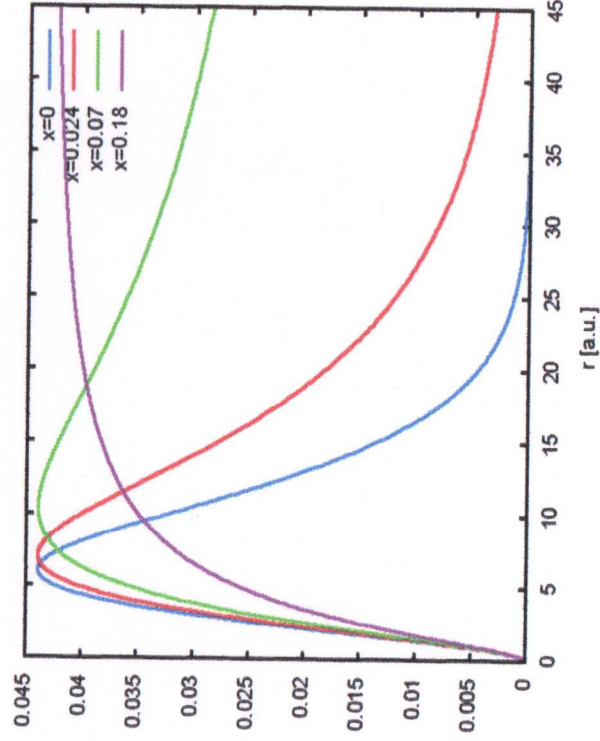


Figura 3: Función de onda hidrogénica con diferentes distorsiones gravitacionales x , estado $3d$.

Agradecimientos.

Se agradece al Gobierno Británico por la Pensión Civil Vitalicia, y al equipo técnico de AIAS por muchas discusiones interesantes. Se agradece a Dave Burleigh por sus 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, "The Principles of ECE Theory" (de libre acceso en el portal www.aias.us como UFT281 a UFT288 y en la sección en idioma castellano, y en formato del libro, en preparación)
- [2] M. W. Evans, Ed. "Definitive Refutations of the Einstein Field Equation" (CISP, www.cisp-publishing.com, 2012, y de libre acceso en el portal www.aias.us).
- [3] M. W. Evans Ed. J. Found. Phys. Chem., (CISP 2011 y de libre acceso en el portal www.aias.us).
- [4] M. W. Evans, S. J. Crothers, H. Eckardt y K. Pendergast, "Critisms of the Einstein Field Equation" (CISP 2010 y de libre acceso en el portal www.aias.us)
- [5] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, "Generally Covariant Unified Field Theory" (Abramis Academic 2005 a 2011 y de libre acceso al portal www.aias.us) en siete volúmenes con encuadernación blanda.
- [6] L. Felker, "The Evans Equations of Unified Field Theory (Abramis 2007 y de libre acceso en el portal www.aias.us, así como su traducción al idioma castellano por Alex Hill).
- [7] M. W. Evans y L. B. Crowell, "Classical and Quantum Electrodynamics and the B(3) Field" (World Scientific 2001 y de libre acceso en el portal www.aias.us).
- [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. Vigiér, "The Enigmatic Photon" (Kluwer, Dordrecht, 1994 a 2002) en cinco volúmenes, tanto con encuadernación dura como blanda.
- [10] M. W. Evans y A. A. Hasanein, "The Photomagnetron in Quantum Field Theory" (World Scientific, 1994).