

Órbitas tridimensionales y cuánticas a partir de la teoría ECE2: Mecánica Cuántica Lagrangiana.

por

M. W. Evans y H. Eckardt

Civil List y AIAS / UPITEC

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

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net)

Resumen.

Se desarrolla la teoría de Euler Lagrange de órbitas tridimensionales y cuánticas, utilizando coordenadas polares esféricas. Se desarrolla una nueva mecánica cuántica de átomos y moléculas a partir del lagrangiano, y se demuestra que produce las funciones de onda hidrogénicas correctas. La ventaja de la mecánica cuántica lagrangiana es que puede desarrollarse para todos los átomos y moléculas de una manera directa. Esta teoría es la misma para la teoría ECE2 y el modelo establecido de la física.

Palabras clave: teoría ECE2, órbitas tridimensionales y cuánticas, mecánica cuántica lagrangiana.

1. Introducción.

En documentos recientes de esta serie [1-12], la teoría lagrangiana del giróscopo se ha desarrollado de distintas maneras. Se ha demostrado que la teoría lagrangiana forma parte de la geometría de Cartan y, por lo tanto, de la teoría de campo unificado covariante generalizada ECE2. La conexión de espín de la geometría de Cartan se ha definido para todos los sistemas de coordenadas en tres dimensiones, y el método puede desarrollarse de muchas maneras. En la Sección 2, se aplica el método a la teoría en órbitas de tres dimensiones, y se desarrolla una nueva mecánica cuántica lagrangiana, cuya corrección se evalúa mediante las funciones de onda hidrogénicas conocidas en forma analítica. La mecánica cuántica lagrangiana puede desarrollarse en forma computacional para todos los átomos y moléculas, mediante la resolución simultánea de conjuntos de ecuaciones de Euler Lagrange a través de métodos numéricos. La teoría se aplica a órbitas esféricas, desarrollando así el contenido del documento UFT 270 y siguientes mediante métodos numéricos.

Este documento es una breve sinópsis de extensos cálculos, que pueden hallarse en las Notas de Acompañamiento del documento UFT371, publicadas en el portal www.aias.us. Las Notas 371(1) a 371(3) definen las coordenadas polares esféricas y ángulos de Euler que pueden utilizarse en la teoría tridimensional de las órbitas. La Nota 371(4) define un esquema de cómputo de órbitas esféricas, empleando las coordenadas polares esféricas como las variables de Lagrange adecuadas. Las tres ecuaciones de Euler Lagrange se resuelven por métodos numéricos, simultáneamente, mediante el código Maxima, y se analizan los resultados en la Sección 3 de este documento. La Nota 371(5) define el lagrangiano para la órbita plana producida a través de la relatividad ECE2. En este caso, hay dos variables propias de Lagrange definidas por las coordenadas polares planas. Las Notas 371(6) a 371(8) desarrollan la mecánica cuántica lagrangiana y demuestran que las órbitas esféricas se cuantizan a funciones de onda hidrogénicas cuya energía potencial se define a través de la atracción entre una masa m que gira en órbita alrededor de una masa M en tres dimensiones.

2. Mecánica Cuántica Lagrangiana y órbitas tridimensionales.

El lagrangiano para órbitas tridimensionales es:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \underline{v} \cdot \underline{v} - U(r) \quad (1)$$

donde m es la masa de un objeto que orbita alrededor de una masa M , y donde \underline{v} es su velocidad. La energía potencial de atracción entre m y M es el potencial gravitacional:

$$U(r) = - \frac{m M G}{r} \quad (2)$$

donde G es la constante de Newton y \underline{r} es el vector que une m y M en el sistema de coordenadas polares esféricas:

$$\begin{aligned} X &= r \sin \theta \cos \phi \\ Y &= r \sin \theta \sin \phi \\ Z &= r \cos \theta. \end{aligned} \quad (3)$$

En este sistema de coordenadas, el lagrangiano(UFT270ysigs.)es:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 (\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 \sin^2 \theta)) + \frac{mMG}{r} \quad (4)$$

y las variable propias de Lagrange son r , θ y ϕ . Hay tres ecuaciones de Euler Lagrange:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) \quad (5)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} \right) \quad (6)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) \quad (7)$$

que deben de resolverse simultáneamente para las varias órbitas posibles. Esta solución se lleva a cabo en forma numérica mediante el empleo del código Maxima, y los resultados se describen en la Sección 3, mediante el empleo de material gráfico. Resulta claro que una órbita debe de ser, en general, tridimensional. Bajo ciertas circunstancias puede que parezca plana, o puede que haya evolucionado a aquello que parezca una órbita plana. Es posible investigar la existencia de órbitas tridimensionales mediante el empleo de métodos astronómicos avanzados. Hay muchas más características de las órbitas tridimensionales que de las órbitas planas, o bidimensionales. Algunas de éstas se han analizado en forma analítica en los documentos UFT270 a UFT276. Sin embargo, el método computacional permite la realización de muchos nuevos logros. Algunos de los mismos se describen y representan gráficamente en la Sección 3.

Se sabe a partir de los documentos UFT270 hasta UFT276 que la órbita tridimensional puede analizarse mediante la definición de la variable propia de Lagrange β mediante la ecuación:

$$\dot{\beta}^2 = \dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 \sin^2 \theta. \quad (8)$$

El lagrangiano tridimensional deviene:

$$L = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\beta}^2) + \frac{mMG}{r} \quad (9)$$

y hay dos ecuaciones de Euler Lagrange:

$$\frac{\partial L}{\partial r} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) \quad (10)$$

y

$$\frac{\partial L}{\partial \beta} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\beta}} \right) \quad (11)$$

dando el resultado:

$$r = \frac{\alpha}{1 + \epsilon \cos \beta} \quad (12)$$

que es una sección cónica en β . Aquí, α es la semi-latitud recta, mientras que ϵ es la excentricidad.

La ecuación de Euler Lagrange (11) da el resultado:

$$\dot{\beta} = \frac{L}{m r^2} \quad (13)$$

donde el momento angular L es una constante de movimiento, es decir:

$$\frac{dL}{dt} = 0. \quad (14)$$

Esta teoría puede aplicarse a la mecánica cuántica de átomos y moléculas, por ejemplo el átomo de hidrógeno, en donde el potencial entre el electrón y el protón es el potencial de Coulomb [1-12]:

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (15)$$

La magnitud de la carga en el electrón de masa m es e , y ϵ_0 es la permitividad en el vacío, en unidades del S.I.

La velocidad clásica del electrón es:

$$v^2 = \left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + r^2 \left(\frac{d\beta}{dt}\right)^2. \quad (16)$$

Utilizando:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\beta} \frac{d\beta}{dt}, \quad (17)$$

$$\frac{d\beta}{dt} = \frac{L}{mr^2} \quad (18)$$

y la Ec. (12), se encontró en la Nota 371(7) que:

$$p^2 = \frac{L^2}{\alpha} \left(\frac{2}{r} - \frac{1}{a}\right) \quad (19)$$

donde p es el momento del electrón. Aquí,

$$a = \frac{\alpha}{1 - \epsilon^2} \quad (20)$$

es el semieje mayor de la sección cónica (12). La cuantización se define mediante el conocido procedimiento de Schroedinger:

$$-\hbar^2 \nabla^2 \psi = p^2 \psi. \quad (21)$$

Por lo tanto, la función de onda radial $\psi(r)$ de la mecánica cuántica lagrangiana se define mediante:

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} = -\frac{L^2}{\hbar^2 \alpha} \left(\frac{2}{r} - \frac{1}{a}\right) \psi \quad (22)$$

Algunos resultados de $\psi(r)$ se han representado gráficamente en la Sección 3.

Las funciones de onda completas del átomo de hidrógeno (H) son:

$$\psi = \psi(r) \psi(\theta, \phi) \quad (23)$$

$$:= R Y$$

donde Y son los conocidos armónicos esféricos [1-12]. El laplaciano en coordenadas polares esféricas es:

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2}$$

$$:= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta^2 \psi \quad (24)$$

en donde

$$\Delta^2 Y = -l(l+1) Y \quad (25)$$

donde l es un entero, el número cuántico del momento angular. Se deduce que la Ec.(21) puede desarrollarse como

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2L^2}{h^2} \frac{R}{r} = \frac{L^2 R}{a \times h^2} \quad (26)$$

El conocido hamiltoniano cuantizado del átomo de hidrógeno es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E \psi \quad (27)$$

que puede desarrollarse como

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)R}{r^2} + \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{R}{r} = -\frac{2mE}{\hbar^2} R \quad (28)$$

Se observa que las Ecs. (26) y (28) son la misma, siempre que:

$$-2mE = \frac{L^2}{a\alpha} \quad (29)$$

y

$$\frac{me^2}{2\pi\epsilon_0} = \frac{2L^2}{\alpha} \quad (30)$$

La energía total E posee valor negativo, de manera que la Ec. (29) es:

$$\frac{L^2}{a\alpha} = 2m|E| \quad (31)$$

es decir que

$$a\alpha = \frac{\alpha^2}{1-\epsilon^2} = \frac{L^2}{2m|E|} \quad (32)$$

que es la definición del semieje menor de la elipse (12):

$$b = \frac{\alpha}{(1-\epsilon^2)^{1/2}} = \frac{L}{(2m|E|)^{1/2}} \quad (33)$$

Q. E. D. De manera que el análisis es rigurosamente consistente.

La Ec. (30) define la constante de movimiento de la mecánica cuántica lagrangiana:

$$L^2 = \frac{\alpha m e^2}{4\pi\epsilon_0} . \quad (34)$$

Dada esta constante de movimiento, tanto el hamiltoniano como el lagrangiano dan ambos las mismas y conocidas funciones de onda hidrogénicas, Q. E. D. La teoría es rigurosamente consistente.

Habiendo demostrado la teoría de esta manera, puede extenderse para dar un nuevo tipo de química cuántica computacional, basada en el lagrangiano (9), las ecuaciones de Euler Lagrange (10) y (11) y la ecuación general de la cuantización:

$$-\hbar^2 \nabla^2 \psi = m^2 (i^2 + r^2 \dot{\theta}^2) \psi . \quad (35)$$

3. Resultados computacionales y gráficos.

3.1 Teoría tridimensional completa.

Las ecuaciones de movimiento del lagrangiano (4) y de las ecuaciones de Lagrange (5)-(7) son:

$$\ddot{\theta} = -\frac{2\dot{r}\dot{\theta} - \dot{\phi}^2 r \cos(\theta) \sin(\theta)}{r}, \quad (36)$$

$$\ddot{\phi} = -\frac{2\dot{\phi}\dot{r} \cos(\theta) \dot{\theta} + 2\dot{\phi}\dot{r} \sin(\theta)}{r \sin(\theta)}, \quad (37)$$

$$\ddot{r} = \frac{r^3 \dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 r^3 \sin^2(\theta) - GM}{r^2}. \quad (38)$$

Además, β se define mediante la ecuación diferencial de primer orden $\dot{\theta}$

$$\dot{\beta} = \sqrt{\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 \sin^2(\theta)} \quad (39)$$

Para un potencial que sólo depende de la coordenada radial r , se deduce un movimiento en un plano. Para las condiciones iniciales:

$$\dot{\theta}(0) = 0, \quad (40)$$

$$\theta(0) = \pi/2 \quad (41)$$

obtenemos un movimiento en el plano XY . En general, las constantes de movimiento son los momentos angulares

$$L = mr^2 \dot{\beta} = mr^2 \sqrt{\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 \sin^2(\theta)}, \quad (42)$$

$$L_\phi = mr^2 \dot{\phi} \sin^2(\theta). \quad (43)$$

Si la condición inicial para $\dot{\theta}$ es diferente de cero, aparece una órbita plana oblícua. Los resultados se representaron gráficamente en las Figs. 1 a 5. La periodicidad en las gráficas muestra que tenemos un movimiento periódico, es decir una elipse. En particular, r oscila entre un valor mínimo y uno máximo (Fig. 2). A partir de la Fig.3 puede observarse que el ángulo β es idéntico a ϕ para movimiento plano (β se ha desplazado a través del empleo de un valor inicial diferente de ϕ). Esto significa que no se obtiene más información inicial a partir de β . Esto podría ser diferente para órbitas no planas.

La órbita en 3D se representa en la Fig. 4, mostrando una elipse rotada contra el plano XY . La Fig. 4 muestra las constantes de movimiento L y L_ϕ computadas a partir de la órbita resultante. Como era de esperar, son constantes, y para una órbita en el plano XY se obtiene

$$L = L_\phi \quad (44)$$

tal como se esperaría. Hasta ahora hemos alcanzado un estado consistente del cálculo numérico.

3.2 Potenciales dependientes del ángulo.

Las órbitas no planas se obtienen a partir de potenciales dependientes de ángulos. En primer lugar utilizamos un potencial dependiente del ángulo polar:

$$U_1 = - \frac{mMG}{r} \text{sen}(\theta). \quad (45)$$

Esto conduce a la órbita obtenida en la Fig. 6. La órbita oscila en altura. Se ven impactadas las constantes de movimiento, el modulo del momento angular (42) ya no es una constante de movimiento, como se observa a partir de la Fig. 7. Sin embargo, el movimiento alrededor del eje Z conserva el momento angular L_ϕ como anteriormente.

Finalmente introducimos una dependencia adicional respecto de ϕ del potencial:

$$U_2 = - \frac{mMG}{r} \text{sen}(\theta) \cos(\phi). \quad (46)$$

Entonces aparece una diferencia entre ϕ y β (Fig. 8). La órbita no es periódica, pero la masa que gira en órbita cae hacia el centro, donde cesa el movimiento, en la parte superior izquierda en la Fig. 9. Ambos momentos angulares ya no son constantes de movimiento, tal como puede apreciarse a partir de la Fig. 10.

3.3 . Solución de la ecuación radial de Schroedinger.

La ecuación radial de tipo Schroedinger (22) se resolvió numéricamente. El método tradicional en física computacional es el de integrar la ecuación para una red de valores de energía (representada aquí por L , α y a) y hallar soluciones no divergentes para $r \rightarrow \infty$. Estos son los *eigen* estados radiales. Utilizamos aquí la integración directa con Maxima, para algunos parámetros pre-definidos. Puede observarse que las soluciones divergen en general.

En las Figs. 11 y 12 se muestran dos soluciones para $L = 1$ y $L = 5$. Estos valores (arbitrarios) correponden en forma aproximada al número extremo de ψ , que representa el *eigen* estado del momento angular, como es el caso para las soluciones físicas convergentes, obtenidas con otros métodos más elaborados.

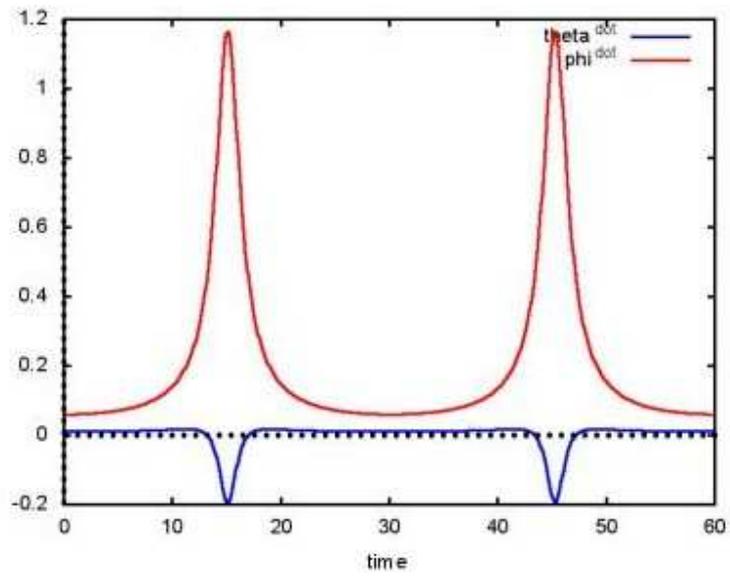


Figura 1: Trayectorias $\dot{\theta}(t)$, $\dot{\phi}(t)$.

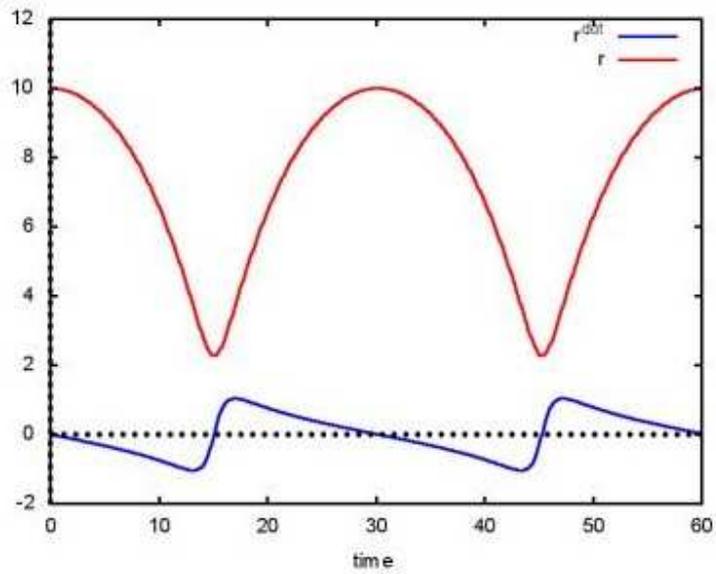


Figura 2: Trayectorias de $\dot{r}(t)$, $r(t)$.

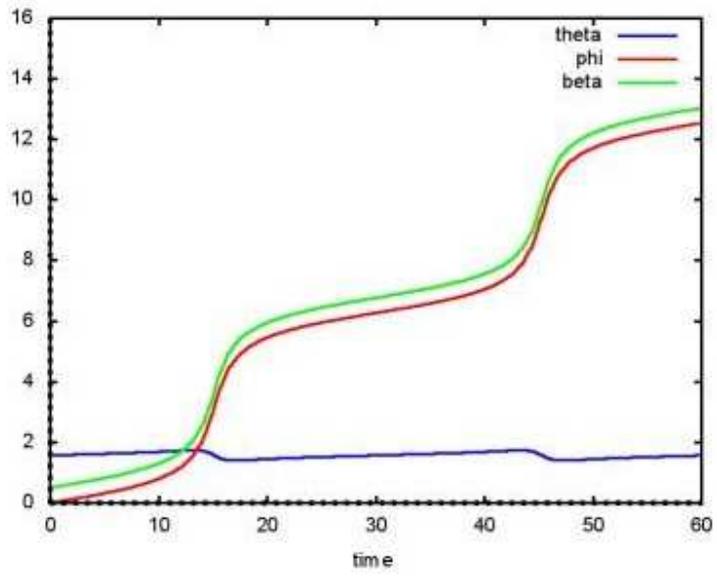


Figura 3: Trayectorias $\theta(t)$, $\phi(t)$, $\beta(t)$.

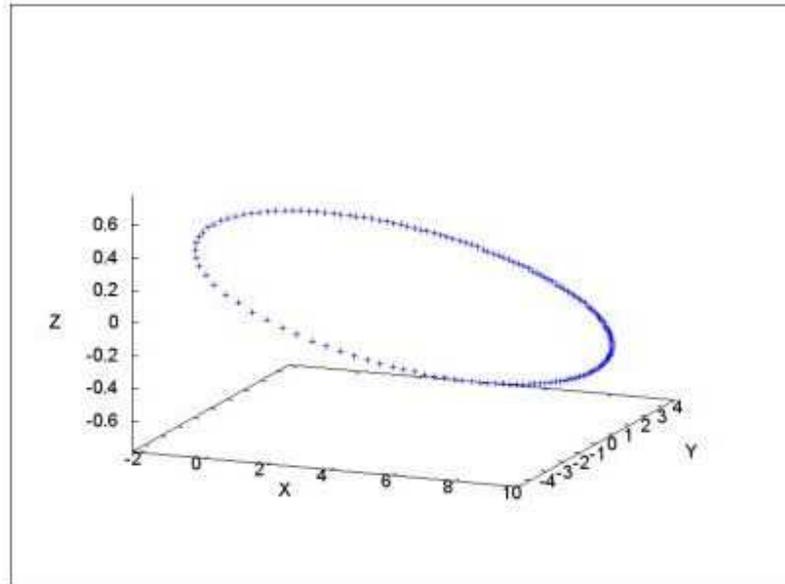


Figura 4: Órbita $r(X, Y, Z)$.

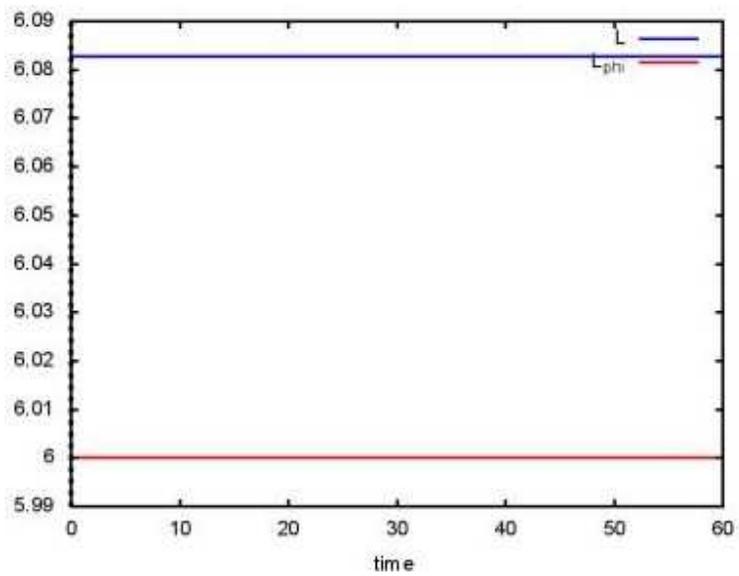


Figura 5: Constantes de movimiento L y L_ϕ .

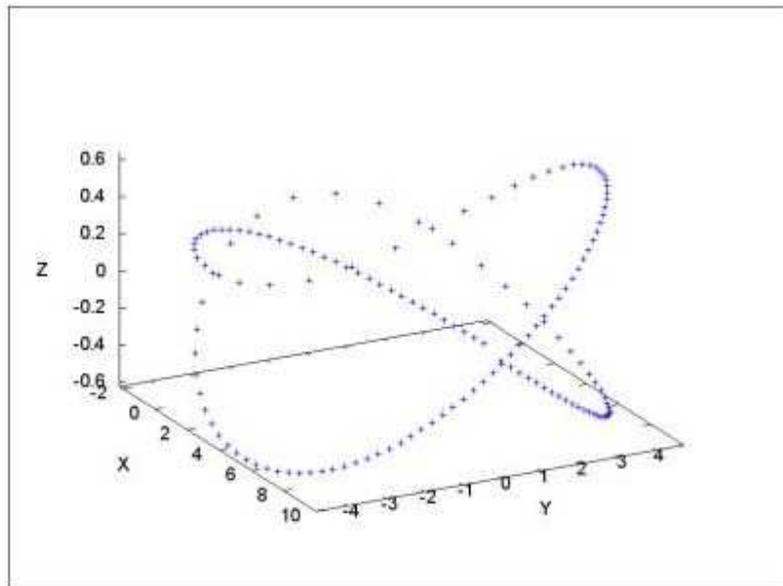


Figura 6: Órbita $r(X, Y, Z)$ para el potencial (45).

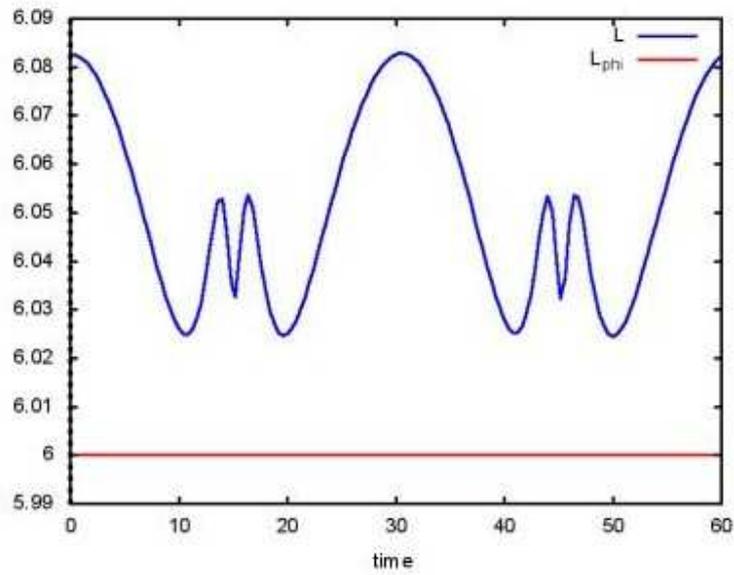


Figura 7: Momentos angulares L y L_{ϕ} para el potencial (45).

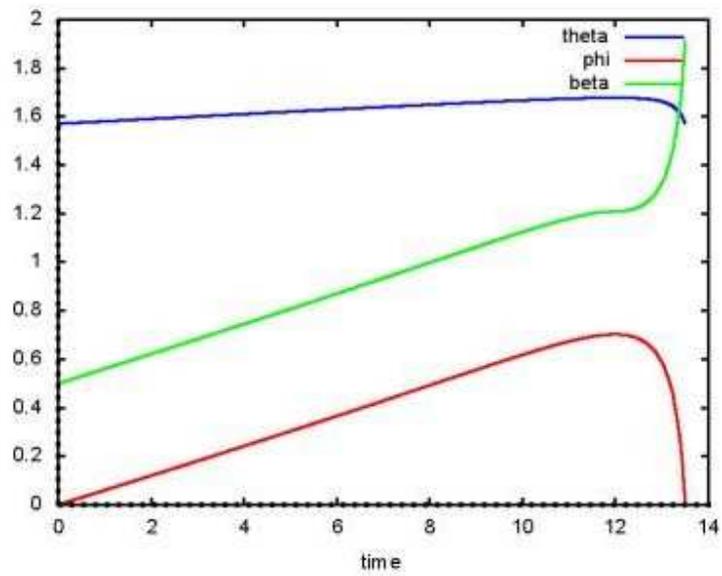


Figura 8: Trayectorias $\theta(t)$, $\phi(t)$, $\beta(t)$ para el potencial (46).

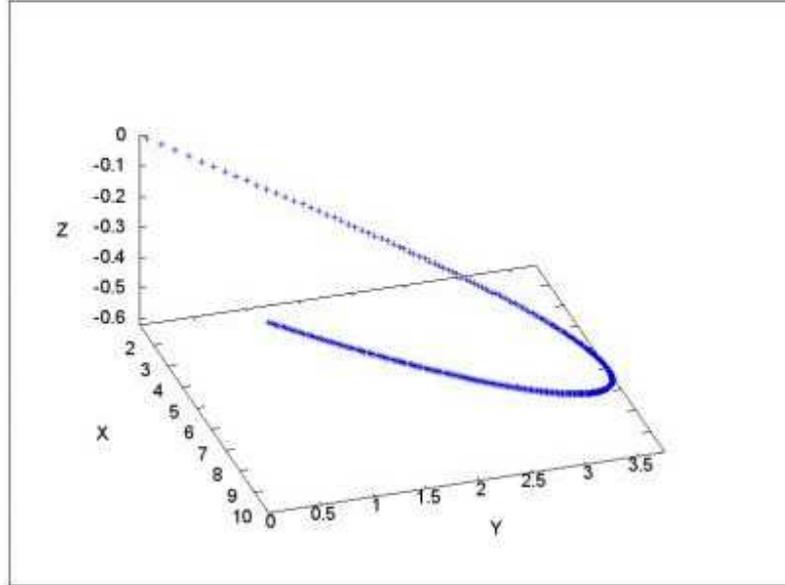


Figura 9: Órbita $r(X, Y, Z)$ para el potencial (46).

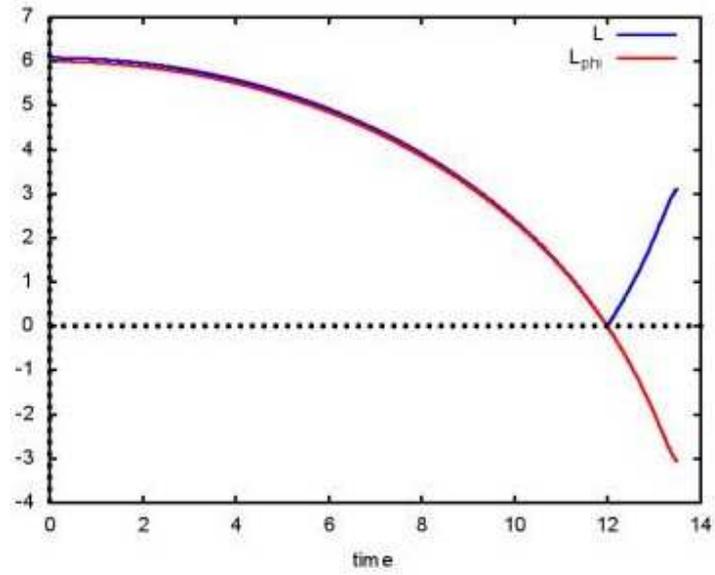


Figura 10: Momentos angulares L y L_ϕ para el potencial (46).

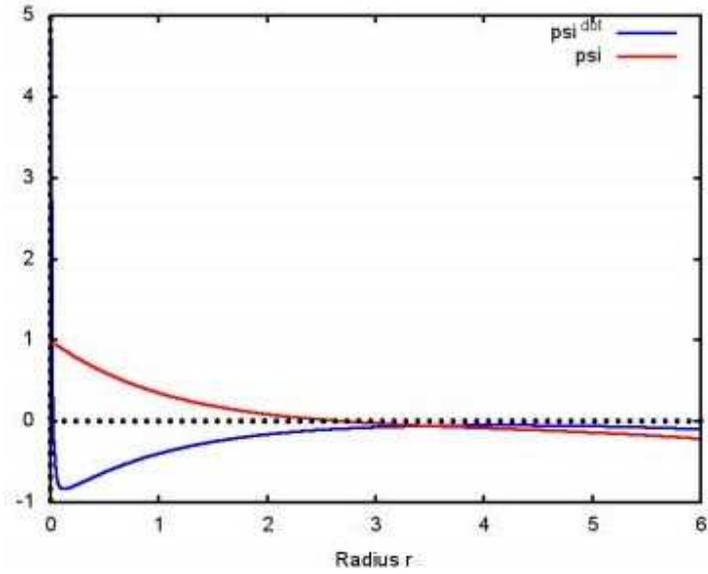


Figura 11: Función de onda radial $\dot{\psi}(r)$, $\psi(r)$ para el parámetro $L = 1$.

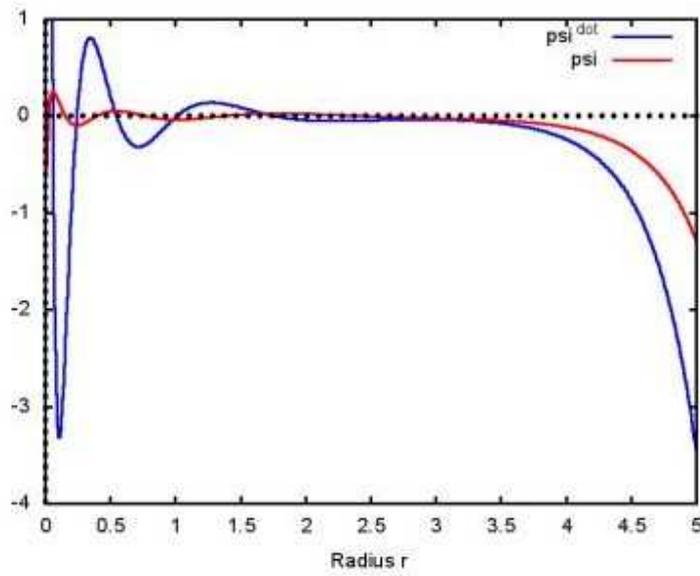


Figura 12: Función de onda radial $\dot{\psi}(r)$, $\psi(r)$ para el parámetro $L = 5$.

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, CEO de Annexa Inc., como anfitrión del portal www.aias.us, por sus labores de mantenimiento y retroalimentación voluntarias, así como las publicaciones en el portal. Se agradece a Alex Hill por las traducciones y lecturas en idioma castellano y a Robert Cheshire por las lecturas en idioma inglés.

Referencias bibliográficas.

- [1] M .W. Evans, H. Eckardt, D. W. Lindstrom y S. J. Crothers, “ECE2: El Segundo Cambio Paradigmático” (UFT366 en los portales www.aias.us y www.upitec.org. (sitios combinados), traducción de Alex Hill, epubli en prep., 2017 / 2018).
- [2] M. W. Evans, H. Eckardt, D. W. Lindstrom y S. J. Crothers, “Principios de ECE” (Sección de Publicaciones de los sitios combinados, UFT350, traducción al castellano por Alex Hill, encuadernación dura epubli 2016, enc. blanda New Generation 2016).
- [3] M .W. Evans, S. J. Crothers, H. Eckardt y K. Pendergast, “Criticisms of the Einstein Field Equation” (UFT301, Cambridge International (CISP), 2010, encuadernación dura).
- [4] L. Felker, “The Evans Equations of Unified Field Theory” (UFT302, traducción al castellano por Alex Hill, Abramis 2007 encuadernación blanda).
- [5] H. Eckardt, “The ECE Engineering Model - Collected Equations” (UFT301 en los sitios combinados).
- [6] M. W. Evans, “Collected Scientometrics” (UFT307 en los sitios combinados, New Generation 2015, encuadernación blanda).
- [7] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, “Generally Covariant Unified Field Theory” (Abramis 2005 a 2011, documentos UFT relevantes en sitios combinados, en siete volúmenes, encuadernación blanda).
- [8] M .W. Evans, Ed., J. Found. Phys. Chem. (CISP 2011, documentos relevantes en los sitios combinados).
- [9] M. W. Evans y L. B. Crowell, “Classical and Quantum Electrodynamics and the $B^{(3)}$ Field” (World Scientific, 2001, sección de Omnia Opera del portal www.aias.us). Encuadernación dura.
- [10] M. W. Evans y S. Kielich (Eds.), “Modern Nonlinear Optics” (Wiley / Interscience, Nueva York, 1992, 1993, 1997, 2001) en dos ediciones y seis volúmenes, encuadernación dura y blanda, y e-libro.
- [11] M. W. Evans y J. - P. Vigiér, “The Enigmatic Photon” (Kluwer 1994 a 2002, enc. Dura y blanda, cinco volúmenes, sección de Omnia Opera del portal www.aias.us).
- [12] M. W. Evans y A. A. Hasanein, “The Photomagnetron in Quantum Field Theory” (World Scientific, 1994).