Desarrollo de las ecuaciones cuánticas de Hamilton.

por

M. W. Evans,
Civil List

(www.aias.us, , www.webarchive.org.uk, www.atomicprecision.com, www.e3tm.net, www.upitec.org)

y

Colegio de Graduados,
Universidad de Gales.

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net)

Resumen.

Se desarrollan las ecuaciones cuánticas de Hamilton, inferidas en el documento UFT 175, para su empleo con conmutadores de orden superior, y se infiere a partir de ellas una útil y novedosa ecuación del movimiento de la mecánica cuántica. Esta ecuación puede utilizarse para hallar una función de onda a partir de un dado hamiltoniano clásico, y es una ecuación de primer orden más fácil de resolver, tanto analítica como numéricamente, que una ecuación de Schroedinger de segundo orden.

Palabras clave: Teoría ECE, ecuaciones cuánticas de Hamilton, conmutadores de orden superior, nueva ecuación de la mecánica cuántica.

1.Introducción.

El desarrollo de una teoría del campo unificado relativamente sencilla, tal como lo es la teoría del campo unificado de Einstein, Cartan Evans (ECE) [1-10] vuelve asequible por primera vez en la física una mecánica cuántica determinista y relativista que no utiliza la interpretación de Copenhague. La ecuación central de la mecánica cuántica de la teoría ECE es la ecuación del fermión, desarrollada en los documentos UFT 172 y siguientes (www.aias.us). Esta ecuación se deduce a partir del postulado de la tétrada de la geometría de Cartan y elimina el concepto de energía negativa de la teoría del campo cuántico. Esta última, por lo tanto, se halla en necesidad de una amplia revisión, pues ya no requiere de una interpretación de múltiples partículas de la ecuación de los fermiones de todo tipo. Durante el transcurso del desarrollo a partir del documento UFT 172, el principio de exclusión de Pauli se ha deducido a partir de la ecuación del fermión, en tanto que se ha refutado directamente el principio de incertidumbre de Heisenberg. En el documento UFT 175 se infirieron nuevas ecuaciones para la mecánica cuántica, y se las denominó como las ecuaciones cuánticas de Hamilton.

En la Sección 2, se deduce una nueva ecuación del movimiento para la mecánica cuántica, directamente a partir de las ecuaciones cuánticas de Hamilton. Utilizando esta ecuación, una función de onda puede deducirse a partir de un dado hamiltoniano clásico, y sin el empleo del operador hamiltoniano de segundo orden de la ecuación de Schroedinger. En el caso de una función de onda independiente del tiempo, esta ecuación asume un formato sencillo, y es generalmente aplicable en toda la mecánica cuántica. Las ecuaciones cuánticas de Hamilton del documento UFT 175 se expresan en un formato canónico que es directamente comparable con las bien conocidas contrapartes clásicas.

En la Sección 3, se desarrollan en forma directa ecuaciones cuánticas de Hamilton de orden superior a partir de álgebra fundamental de conmutadores, y se ilustran los métodos de esta sección mediante el conmutador de segundo orden de posición x y de momento p en la representación cartesiana unidimensional. Este conmutador se deduce en forma consistente en la representación de posición. Se considera la reducción de las ecuaciones cuánticas de Hamilton a las correspondientes clásicas ecuaciones de paréntesis angulares de Poisson en el contexto del principio de incertidumbre de Heisenberg, cuya filosofía queda demostrada como habiéndose derivado a partir de una consideración fortuita y exclusiva de conmutadores de primer orden.

Finalmente en la Sección 4, se presenta un ejemplo de las ecuaciones canónicas cuánticas de Hamilton para la rotación en un plano.

2. Una nueva ecuación de la mecánica cuántica.

Las dos ecuaciones cuánticas de Hamilton desarrolladas en el documento UFT 175 son:

$$i\hbar \frac{d}{dq} < \hat{H} > = < [\hat{H} , \hat{p}] > \tag{1}$$

y

$$i\,\hbar\,\frac{d}{dp} < \hat{H} > = - < [\hat{H}\ ,\hat{q}\ ]\ > \tag{2}$$

donde $\hat{q}$ y $\hat{p}$ son los operadores canónicos que corresponden a las variables canónicas q y p de las ecuaciones clásicas de Hamilton [11]. Utilizando la suposición [12]:

$$\frac{d}{dq} < \hat{H} > = < \frac{d\hat{H}}{dq} > \ ,\ \ \frac{d}{dp} < \hat{H} > = < \frac{d\hat{H}}{dp} > \tag{3}$$

pueden colocarse estas ecuaciones en formato de operador como sigue:

$$i\,\hbar\,\frac{d\hat{H}}{dq}\,\psi = [\hat{H}\ ,\hat{p}\ ]\,\psi \tag{4}$$

y

$$i\,\hbar\,\frac{d\hat{H}}{dp}\,\psi = -\,[\hat{H}\ ,\hat{q}\ ]\,\psi \tag{5}$$

donde ψ es la función de onda. En estas ecuaciones $\hbar$ es la constante reducida de Planck. Empleando el formato cartesiano unidimensional:

$$\hat{q} = \hat{x} \quad , \quad \hat{p} = \hat{p} \quad . \tag{6}$$

En la representación de posición, el axioma de Schroedinger [13, 14] es:

$$\hat{p}\ \psi = -\,i\,\hbar\,\frac{d\psi}{dx} \quad , \quad \hat{x}\ \psi = x\,\psi \tag{7}$$

y en la representación de momento:

$$\hat{x}\ \psi = \ i\,\hbar\,\frac{d\psi}{dx} \quad , \quad \hat{p}\ \psi = p\,\psi \quad . \tag{8}$$

Si se define el hamiltoniano como:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \mathrm{V}\,(x) \tag{9}$$

entonces

$$\frac{dH}{dx} = \frac{p^2}{2m} + \frac{dV}{dx} \tag{10}$$

porque en la dinámica hamiltoniana x y p son variables independientes canónicas. Por lo tanto, la Ec. (3) se satisface automáticamente. Utilizando el resultado:

$$[\hat{H}\ ,\hat{p}\ ]\ \psi\ =\ i\,\hbar\,\frac{dV}{dx}\,\psi = -\,i\,\hbar\,F\psi \tag{11}$$

donde F es fuerza, la Ec. (4) da origen a una nueva ecuación de fuerza de la mecánica cuántica:

$$\boxed{-\left(\frac{d\hat{H}}{dx}\right)\psi = F\psi} \tag{12}$$

donde el eigenoperador se define mediante:

$$\frac{d\hat{H}}{dx} := -\,\hbar^2\,\frac{\partial^3}{\partial x^3} + \frac{dV(x)}{dx} \quad . \tag{13}$$

En el límite clásico, el principio de correspondencia de la mecánica cuántica significa que la Ec. (12) deviene una de las ecuaciones de Hamilton:

$$F = \frac{dp}{dt} = -\left(\frac{dH}{dx}\right) \ . \tag{14}$$

En la representación de momento, la Ec. (5) da origen a una segunda ecuación fundamental de la mecánica cuántica:

$$\boxed{\left(\frac{d\hat{H}}{dp}\right)\psi = v\ \psi} \tag{15}$$

donde los eigenvalores son aquellos de la velocidad cuantizada v. Aquí:

$$\frac{dH}{dp} = \frac{p}{m} \tag{16}$$

y

$$\left(\frac{d\hat{H}}{dp}\right)\psi = v\ \psi \quad . \tag{17}$$

La Ec. (15) corresponde en el límite clásico a la segunda ecuación de Hamilton:

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{dH}{dp} \quad . \tag{18}$$

La formulación general, o canónica de las Ecs. (12) y (15) es la siguiente:

$$-\left(\frac{d\hat{H}}{dq}\right)\psi = F\,\psi \tag{19}$$

y

$$\left(\frac{d\hat{H}}{dp}\right)\psi = v\,\psi \tag{20}$$

que se reducen a las ecuaciones canónicas de Hamilton [15]:

$$-\frac{dH}{dq} = \frac{dp}{dt} \tag{21}$$

y

$$\frac{dH}{dp} = \frac{dq}{dt} \quad . \tag{22}$$

El equivalente rotacional de la Ec. (4) es:

$$i\,\hbar\left(\frac{d\hat{H}}{d\varphi}\right)\psi = [\hat{H}, \hat{J}_Z]\,\psi \tag{23}$$

en la que las variables canónicas son:

$$q = \varphi \quad , \quad \hat{p} = \hat{J}_Z \quad . \tag{24}$$

Para problemas rotacionales en la mecánica cuántica de átomos y moléculas, $\hat{H}$ conmuta con $\hat{J}_Z$ [12 -14] , de manera que

$$[\hat{H}, \hat{J}_Z]\,\psi = 0 \tag{25}$$

en cuyo caso:

$$\left(\frac{d\hat{H}}{d\varphi}\right)\psi = 0 \quad . \tag{26}$$

Con el objeto de que $d\hat{H} \,/\, d\varphi$ sea distinto de cero, debe de haber una energía potencial dependiente de φ en el hamiltoniano:

$$H = \frac{J^2}{2\,I} + V(\varphi) \tag{27}$$

de manera que el operador hamiltoniano debe de ser:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,I}\hat{\Lambda}^2 + V(\varphi) \tag{28}$$

donde $\hat{\Lambda}^2$ es el operador lagrangiano [12-14]. En este caso:

$$\frac{d\hat{H}}{d\varphi} = -\frac{\hbar^2}{2\,I}\hat{\Lambda}^2 + \frac{dV}{d\varphi} \tag{29}$$

y la Ec. (23) da origen a la ecuación del torque en la mecánica cuántica:

$$-\left(\frac{d\hat{H}}{d\varphi}\right)\psi = T\mathrm{q}\,\psi = -\left(\frac{dV}{d\varphi}\right)\psi \tag{30}$$

donde Tq son eigenvalores de torque.

3. Ecuaciones cuánticas de Hamilton de orden superior.

Las ecuaciones cuánticas de Hamilton de orden superior se construyen directamente a partir de álgebra de conmutadores [13–15]. Por ejemplo:

$$[\hat{A}\,,\hat{p}\hat{p}\,] = [\hat{A}\,,\hat{p}\,]\,\hat{p} + \hat{p}\,[\hat{A}\,,\hat{p}\,] \tag{31}$$

de manera que la ecuación cuántica de Hamilton relevante es:

$$[\hat{A}\,,\hat{p}\hat{p}\,]\,\psi = i\,\hbar\left(\frac{d\hat{A}}{dx}\,\hat{p} + \hat{p}\,\frac{d\hat{A}}{dx}\right)\psi \quad . \tag{32}$$

Si el operador $\hat{A}$ es, por ejemplo:

$$\hat{A} = \hat{x}\hat{x} \tag{33}$$

entonces:

$$[\hat{x}\hat{x},\hat{p}\hat{p}\,]\,\psi = i\,\hbar\left(\frac{d\hat{x}\hat{x}}{dx}\,\hat{p} + \hat{p}\,\frac{d\hat{x}\hat{x}}{dx}\right)\psi \quad . \tag{34}$$

donde:

$$\frac{d\hat{x}\hat{x}}{dx}\,\psi = 2x\,\psi \quad . \tag{35}$$

De manera que, como en el documento UFT 175:

$$[\hat{x}\hat{x},\hat{p}\hat{p}\,]\,\psi = 2\,i\,\hbar\,\{\hat{x}\,,\hat{p}\,\}\,\psi \tag{36}$$

Q. E. D. En la representación de posición:

$$\hat{p}\ \psi = -\ i\ \hbar\ \frac{d\psi}{dx} \tag{37}$$

y

$$\{\hat{x}\ ,\hat{p}\ \}\ \psi\ = \hat{x}\ (\hat{p}\ \psi\ ) + \hat{p}\ (\hat{x}\ \psi\ ) \tag{38}$$

de manera que el anticonmutador de $\hat{x}$ y $\hat{p}$ es:

$$\{\hat{x}\ ,\hat{p}\ \}\ \psi\ = -\ i\ \hbar\ (\ x\ \frac{d\psi}{dx} + \frac{d}{dx}\ (x\ \psi)) = -\ i\ \hbar\ (\psi + 2x\ \frac{d\psi}{dx}\ )\ . \tag{39}$$

Por lo tanto:

$$[\hat{x}\hat{x},\ \hat{p}\hat{p}\ ]\ \psi = 2\ \hbar^2\ \psi + 4\ ix\hat{p}\ \psi \tag{40}$$

como en el documento UFT 175.

Sean $\hat{A}$ y $\hat{B}$ dos operadores hermíticos de la mecánica cuántica [13–15], entonces como demostró por primera vez Dirac [12]:

$$\frac{<[\hat{A},\hat{B}]>}{i\ \hbar}\ \xrightarrow[\hbar \to 0]{}\ (\ A,\ B\ ) \tag{41}$$

donde el paréntesis angular de Poisson de la mecánica clásica es:

$$(\ A,\ B\ )\ = \frac{\partial A}{\partial x}\ \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial B}{\partial x}\ \frac{\partial A}{\partial p}\quad . \tag{42}$$

Por lo tanto, las ecuaciones cuánticas de Hamilton se reducen de la siguiente manera a los paréntesis angulares de Poisson:

$$\frac{d<\hat{H}>}{dx}\ \xrightarrow[\hbar \to 0]{}\ (\ H,\ p\ ) \tag{43}$$

$$\frac{d<\hat{H}>}{dp}\ \xrightarrow[\hbar \to 0]{} -(\ H,\ x\ ) \tag{43a}$$

En el límite clásico:

$$\frac{dH}{dx} = (H,\ p)\quad , \tag{44}$$

$$\frac{dH}{dp} = -\ (H,\ x)\quad , \tag{45}$$

ahora utilizando las ecuaciones [15] de la dinámica clásica:

$$\frac{dp}{dt} = (p\,, H) \quad , \quad \frac{dx}{dt} = (x\,, H) \tag{46}$$

para recuperar las ecuaciones de Hamilton en forma consistente:

$$\frac{dH}{dp} = \frac{dx}{dt} \quad , \quad \frac{dH}{dx} = -\frac{dp}{dt} \tag{47}$$

Q.E.D.

Tal como se demostró en el documento UFT 175, el valor esperado $<[\hat{x}\hat{x},\ \hat{p}\hat{p}]>$ es igual a cero para todas las funciones de onda del oscilador armónico, y distinto de cero para todas las funciones de onda del átomo de H. En consecuencia, se refuta la interpretación de Copenhague de la mecánica cuántica, pues si el valor esperado es igual a cero, $\hat{x}\hat{x}$ y $\hat{p}\hat{p}$ son simultáneamente cognoscibles para cualquier grado de precisión. Si el valor esperado es distinto de cero, ya sea $\hat{x}\hat{x}$ ó $\hat{p}\hat{p}$ pueden ser absolutamente incognoscibles, es decir, indeterminados. Estas afirmaciones no pueden ser ambas ciertas al mismo tiempo para los mismos operadores de la misma ecuación. Por lo tanto, la interpretación de Copenhague queda reducida al absurdo, Q.E.D.

La totalidad de las afirmaciones de la escuela de Copenhague se basaba en
:

$$[\hat{x}\,, \hat{p}\,]\,\psi = i\,\hbar\,\psi \tag{48}$$

con la propiedad:

$$\frac{<[\hat{x},\hat{p}]>}{i\,\hbar} \xrightarrow[\hbar \to 0]{} 1 = (\,x, p\,) \quad . \tag{49}$$

Sucede que el paréntesis angular de Poisson es una constante, igual a la unidad. Sin embargo, conmutadores de orden superior dan resultados tales como:

$$\frac{<[\hat{x}\hat{x},\hat{p}\hat{p}]>}{i\,\hbar} \xrightarrow[\hbar \to 0]{} (x^2, p^2\,) \tag{50}$$

los cuales pueden ser iguales o distintos de cero según cual fuese la función de onda considerada. En ambos casos la regla general es:

$$\frac{<[\hat{A},\hat{B}]>}{i\,\hbar} \xrightarrow[\hbar \to 0]{} (\,A, B\,) \quad . \tag{51}$$

La interpretación de Copenhague se obtuvo en forma íntegra a partir de:

$$(\,A, B\,) = 1 \tag{52}$$

en cuyo caso:

$$\delta\, \hat{A}\ \ \delta\, \hat{B} \geq \frac{1}{2}\, |< \hat{C} >| \tag{53}$$

donde $\delta\, \hat{A}$ y $\delta\, \hat{B}$ son desviaciones cuadráticas medias respecto de la media [12–14]. Si el valor esperado:

$$< \hat{C} > = \frac{1}{i} < [\hat{A}, \hat{B}] > \tag{54}$$

no es constante, la interpretación de Copenhague deja de tener sentido, como ya se mencionó.

Finalmente en esta sección, la deducción del resultado (40) se verifica mediante el álgebra de conmutadores [12, 13]:

$$[\hat{A}\hat{B}\ ,\ \hat{C}\hat{D}\ ]\ \psi = ([\hat{A}\hat{B}\ ,\ \hat{C}\ ]\ \hat{D} + \hat{C}\ [\hat{A}\hat{B}\ ,\ \hat{D}\ ])\ \psi \tag{55}$$

donde:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\ ]\ \psi = (\ [\hat{A}, \hat{B}]\ \hat{C} + \hat{B}\ [\hat{A}, \hat{C}\ ])\ \psi \quad . \tag{56}$$

Así:

$$[\hat{C}\hat{D}\ , \hat{A}\hat{B}\ ]\ \psi = (\ [\hat{C}, \hat{A}\ ]\ \hat{B}\hat{D} + \hat{A}\ [\hat{C}, \hat{B}\ ]\ \hat{D} + \hat{C}\ [\hat{D}, \hat{A}\ ]\ \hat{B} + \hat{C}\hat{A}\ [\hat{D}, \hat{B}\ ]\ )\ \psi \quad . \tag{57}$$

Al igual que para todas las ecuaciones de conmutadores, esto resulta cierto en todas las representaciones, tales como las representaciones de posición y de momento. Así:

$$[\hat{x}\hat{x}\ , \hat{p}p\ ]\ \psi = (\ [\hat{x}, \hat{p}\ ]\ \hat{p}\hat{x} + \hat{p}\ [\hat{x}, \hat{p}\ ]\ \hat{x} + \hat{x}\ [\hat{x}, \hat{p}\ ]\ \hat{p} + \hat{x}\hat{p}\ [\hat{x}, \hat{p}\ ]\ )\ \psi \quad . \tag{58}$$

Ahora utilizamos:

$$[\hat{x}, \hat{p}\ ] = i\ \hbar \tag{59}$$

para hallar:

$$[\hat{x}\hat{x}\ , \hat{p}p\ ]\ \psi = (i\ \hbar\, \hat{p}\hat{x} + i\ \hbar\, \hat{p}\hat{x} + i\ \hbar\hat{x}\, \hat{p} + i\ \hbar\hat{x}\, \hat{p}\ )\ \psi = 2\ i\ \hbar\ [\hat{x}, \hat{p}\ ]\ \psi \tag{60}$$

Q. E. D.

4. Ecuaciones cuánticas de Hamilton para la rotación en un plano.

Consideremos la ecuación canónica cuántica de Hamilton:

$$i\ \hbar\, \frac{d\hat{H}}{dq}\ \psi = \ [\hat{H}\ , \hat{p}\ ]\ \psi \quad . \tag{61}$$

Para la rotación en un plano en la representación de posición:

$$\frac{d}{dq} = \frac{d}{d\varphi} \quad , \quad \hat{p}_\psi = \hat{J} \tag{62}$$

donde $\hat{J}$ es el operador del momento angular [12–14]. Por lo tanto, la ecuación cuántica de Hamilton para la rotación en un plano es:

$$i\,\hbar \frac{d\widehat{H}}{d\varphi}\,\psi = [\widehat{H}\,,\hat{J}\,]\,\psi \tag{63}$$

que corresponde a la ecuación clásica de Hamilton:

$$\frac{dH}{d\varphi} = -\frac{dJ}{dt} \quad . \tag{64}$$

El hamiltoniano clásico [15] es:

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2}\,mr^2\left(\frac{d\varphi}{dt}\right)^2 \tag{65}$$

y el momento angular es:

$$\mathrm{J} = mr^2\frac{d\varphi}{dt} \tag{66}$$

Si el momento angular conmuta con el hamiltoniano, entonces es una constante de movimiento [12–15]:

$$\frac{dJ}{dt} = 0 \quad . \tag{67}$$

Por lo tanto:

$$\frac{dH}{d\varphi} = 0 \quad . \tag{68}$$

Consistentemente:

$$\frac{dH}{dJ} = \frac{dH}{d\dot{\varphi}}\,\frac{d\dot{\varphi}}{dJ} = \frac{mr^2}{mr^2}\,\frac{d\varphi}{dt} = \frac{d\varphi}{dt} \quad . \tag{69}$$

El origen de la ecuación cuántica de Hamilton es la tautología:

$$i\,\hbar \frac{<d\hat{\varphi}>}{d\varphi}\,\psi = <[\hat{\varphi}\,,\hat{p}\,]> \tag{70}$$

la cual es el equivalente para movimiento rotacional plano de la tautología desarrollada en el documento UFT 175:

$$i\,\hbar\,\frac{<d\hat{x}>}{dx}\,\psi = <[\hat{x}\;,\hat{J}\;]> \tag{71}$$

En la representación de momento la tautología relevante es:

$$i\,\hbar\,\frac{<d\hat{J}>}{dJ}\,\psi = -<[\hat{J},\hat{\varphi}\;]> \tag{72}$$

de manera que:

$$i\,\hbar\,\frac{<d\hat{H}>}{dJ}\,\psi = -<[\hat{H},\hat{\varphi}\;]> \tag{73}$$

que corresponde a la ecuación clásica de Hamilton para movimiento rotacional en un plano:

$$\frac{dH}{dJ} = \frac{d\varphi}{dt} \quad . \tag{74}$$

Agradecimientos.

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

Referencias.

[1] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, "Generally Covariant Unified Field Theory" (Abramis 2005 en adelante), volúmenes 1 - 7 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] Kerry Pendergast, "The Life of Myron Evans" (Cambridge International Science Publishing, 2011).

[4] L. Felker, "The Evans Equations of Unified Field Theory" (Abramis 2007, traducci{on al castellano por Alex Hill en el portal www.aias.us).

[5] Los portales de la teoría ECE www.aias.us, www.atomicprecision.com, www.et3m.net, www.upitec.org. El portal www.aias.us se archiva en el portal www.webarchive.org.uk, de la

Biblioteca Nacional de Gales, en Aberystwyth, como portal sobresaliente británico.
[6] M. W. Evans y H. Eckardt, “The Fermion Equation” (Cambridge International Science Publishing, en prep.).
[7] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, “ECE Theory Applied to H Bonding” (Academia de Ciencias de Serbia, 2010).
[8] M. W. Evans, (ed.), “Modern Nonlinear Optics” (Wiley, 2001, segunda edición), en tres volúmenes; ibid., primera edición, ed. M. W. Evans y S. Kielich (Wiley 1992, 1993 y 1997), en tres 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. Vigier, “The Enigmatic Photon” (Kluwer, 1994 a 2002), en cinco volúmenes.
[11] W. R. Hamilton, primera deducción en 1833.
[12] E. Merzbacher, “Quantum Mechanics” (Wiley 1970, segunda edición).
[13] L. H. Ryder, “Quantum Field Theory” (Cambridge University Press, 1996, segunda edición).
[14] P. W. Atkins, “Molecular Qauntum Mechanics” (Oxford Univrsity Press, 1983, segunda edición).
[15] J. B. Marion y S. T. Thornton, “Classical Dynamics” (Harcourt, Nueva York, 1988), tercera edición).