La Ecuación de Schrödinger interpretada en el Espacio Paravectorial No Homogeneo Cuatridimensional

Rafael Aparicio Sánchez[1]

April, 10, 2006

Abstract

The present paper is a part (in Spanish) of the one book of the author now in printing process about the use of the Non Homogeneous Four Dimensional Paravectorial Space based on the Special Orthogonal Group of Degree 4, basis for a Geometrical Interpretation of physical phenomenon. In this article, the question is about the generalization of quantum mechanics Schrödinger's equation through another point of view that the previous article *"Geometrical Study of the Schroedinger Formula With the Even Sub Group of the Clifford Geometric Algebra"* but with the same postulates, that are that wave function is not "imaginary" and has no virtual parts, and that is not necessary the Born step to probabilistic calculus of Quantum Mechanics. Although is not written in English, mathematics are universal language, and are easy to understand. Another utilizations that are explained in the book utilizes this space to go from Minkowski Spacetime to a non homogeneous one, that gives geometrical visualizations much more comprehensive than Minkowsky diagrams.

Introducción

Hay varios modos de "acercarse" a la ecuación de Schrödinger por medio de las algebras de Clifford, y uno de los medios más interesantes es a traves de los paravectores. Además es conveniente por una cuestión muy sencilla: las formulaciones de Dirac y Pauli, basadas en matrices, están alejadas de la formulación diferencial de la Ecuación de Schrödinger, y de algún modo por medio de los paravectores este "problema" puede sortearse. Una de las formas de abordar dicha ecuación es a través de la formulación ya obtenida en el artículo anterior y con el acercamiento que proveen las algebras geométricas (GA) con las interpretaciones de lo que está ocurriendo, de una forma más intuitiva. La otra forma es por medio de los postulados de los que se parte para encontrar la ecuación de Schrödinger haciéndola extensible a 4 dimensiones del espacio tiempo.

Una cuestión importante a tener en cuenta es que la función de onda no es, en este caso, tomada como aquella a quien *las rotaciones le afectan¸* sino aquella que es *el paravector (cuaternión) de rotación.*

[1] Ingeniero Técnico Industrial Mecánico por la Universidad Politécnica de Valencia, Becado por el IMPIVA en el Instituto Tecnológico AIMME en proyectos de Reverse Engineering con Superficies Complejas (Bezier-Casteljou, B-Splines y Nurbs) con metrología 3D. Actualmente Consultor de Empresas.

Un modo tradicional de abordar la Ecuación de Schrödinger

Un modo de abordar la ecuación de Schrödinger parte de unos postulados bastante sencillos. Aunque el postulado de Broglie era consistente con la relatividad especial, Schrödinger desarrolló una teoría no relativística, abandonando el término “onda piloto” y utilizando la función de onda (o ecuación de estado, que da una idea mucho más aproximada de su significado) a la función $\Psi(x,t)$. Además, tomó en consideración los siguientes postulados:

1. La ecuación $\lambda = h/p$
2. La ecuación $\nu = E/h$
3. Supuso que la energía venía dada por la ecuación no relativística: $E=p^2/2m + V$
4. usando el punto 3, llegó al resultado:

   $$\mathbf{h}w = \frac{\mathbf{h}^2 k^2}{2m} + V_0$$

   Donde $k=2\pi/\lambda$ y $\omega= 2\pi\nu$

   Por lo tanto

   $$v_g = \frac{\partial w}{\partial k} = \frac{\mathbf{h}k}{m} = \frac{p}{m} = n$$

5. La ecuación de propagación de ondas debe ser además lineal en $\Psi(x,t)$, para que puedan suponerse funciones de onda y reproducir los efectos de la interferencia y difracción observados por Davisson y Germer y
6. El impulso de una partícula libre debe ser constante, y por tanto $V=V_0=cte.$ La ecuación debe tener soluciones de onda viajera.

La ecuación buscada puede ser de la forma:

$$a\,\mathbf{h}\frac{\partial \Psi_f}{\partial t} = \frac{b\,\mathbf{h}^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_f}{\partial x^2} + V_0 \Psi_f$$

Donde tanto α como β son constantes por determinar. Como la ecuación anterior es lineal, satisface uno de los requisitos anteriores. La solución pasa por ser una combinación lineal del tipo:

$$\Psi_f = \cos(kx - wt) + g\,\sin(kx - wt)$$

Las soluciones que dan el resultado son las que tienen el valor de $\gamma=\pm i$, $\alpha=\gamma$ y $\beta=-1$. Como lo usual es tomar $\gamma=+i$, $\alpha=i$ y la ecuación obtenida es:

$$i\mathbf{h}\frac{\partial \Psi_f}{\partial t} = -\frac{\mathbf{h}^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_f}{\partial x^2} + V_0 \Psi_f$$

Que cumple con los requisitos estipulados anteriormente. La solución de onda viajera **en el eje *x*** es por tanto de la forma:

$$\Psi_f = \cos(kx - wt) + i\sin(kx - wt) = e^{i(kx-wt)}$$

La generalización que usualmente se suele realizar es que la anterior es válida para una dimensión, y que por tanto la ecuación para las tres dimensiones espaciales es la siguiente:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$$

Con solución:

$$H\Psi(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m}\Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

Pero nosotros vamos a demostrar que la ecuación anterior tiene una generalización geométrica del tipo:

$$\Psi_f = \cos(k\vec{r} - wt) + \vec{u}\sin(k\vec{r} - wt) = e^{\vec{u}(k\vec{r}-wt)}$$

que además es la expresión de un cuaternión. Se podría haber llegado de una forma sencilla por medio de la expansión en series de Taylor. Si tenemos que:

$$\cos q + i\sin q = e^{iq}$$

Si el factor *i* es sustituido por una base vectorial $\hat{i}$ se podría escribir:

$$\cos q + \hat{i}\sin q = e^{\hat{i}q}$$

Y dado que se puede mover dicho eje mientras cumpla las condiciones anteriores, podría darse el caso que:

$$\cos q + \hat{u}\sin q = e^{\hat{u}q} = \cos(k\vec{r} - wt) + \vec{u}\sin(k\vec{r} - wt)$$

Hacia una generalización paravectorial de la Ecuación de Schrödinger

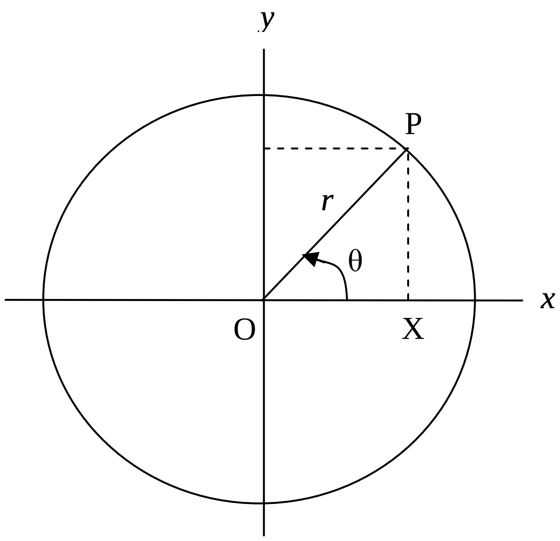
Podemos trabajar en cuatro dimensiones con los paravectores (cuaterniones) en el Grupo Especial Ortogonal SO(4). Vamos a hacer uso de esa aproximación y vamos a buscar ***otra* generalización tridimensional** de la ecuación de Schrödinger. En primer lugar, sabemos que un número complejo (cual es el caso de Ψ_f) puede tener asociado un vector rotatorio. Supongamos un movimiento armónico simple de amplitud A y frecuencia angular ω sobre cualquier recta contenida en el plano del círculo. En particular, si imaginamos un eje *y* perpendicular al eje físico real *Ox* del movimiento real, el vector rotatorio *OP* nos define además de la verdadera oscilación sobre el eje *x*, otra oscilación ortogonal sobre el eje y, de modo que:

$$x = A \cos(\omega t + \alpha)$$

y

$$y = A \operatorname{sen}(\omega t + \alpha)$$

Cuando tratamos un movimiento armónico simple en *x*, el movimiento en *y* no tiene “existencia real”, si bien se trata al movimiento como si tuviera un punto en dos dimensiones del cual solo se tiene en cuenta la componente *x*, teniendo solo este significado físico en el movimiento descrito.



Un modo para que no exista ambigüedad en dos dimensiones y en el movimiento armónico simple sobre el eje *x* para establecer y mantener la diferencia existente entre las componentes *físicamente reales* y las *no reales* del movimiento. Suponiendo el vector *OP* de la figura anterior, este tiene coordenadas polares (r, θ). Las componentes (x, y) rectangulares o cartesianas vienen dadas evidentemente por las ecuaciones:

$$x = \vec{r} \cos q$$

e

$$y = \vec{r} \sin q$$

El vector $\vec{r}$ completo puede expresarse entonces como el vector suma de los dos componentes ortogonales, para lo cual podemos utilizar la notación usual en análisis vectorial con el vector unitario $\hat{i}$ para designar los desplazamientos a lo largo del eje *x*, y el vector unitario $\hat{j}$ para designar los desplazamientos a lo largo del eje *y*. Pondremos entonces:

$$\vec{r} = \hat{i}x + \hat{j}y$$

Sin sacrificar ninguna información se puede escribir el vector mediante la eliminación de cualquiera de las dos $\hat{i}$ ó $\hat{j}$. Vamos a eliminar la correspondiente a la componente de *x*, **y por convención vamos a sustituir el vector unitario $\hat{j}$ por el factor complejo *i*** como exponente complejo (para no crear confusiones posteriormente cuando tratemos con los otros ejes) llegando a la ecuación siguiente:

$$\vec{r} = x + iy$$

Con la única precisión de mantener el convenio de que un desplazamiento como *x* sin ningún factor que lo califique, ha de realizarse en una dirección paralela al eje *x* y que el término ***iy*** tiene que interpretarse como una instrucción para hacer que el desplazamiento *y* sea en una dirección paralela al eje *y*. Usualmente también se prescinde de la notación vectorial y es sustituida por *z*. La interpretación del símbolo ***i*** puede interpretarse como una instrucción para realizar una rotación de 90º en sentido contrario a las agujas del reloj al desplazamiento que precede. De de este modo, si tenemos una magnitud cualquiera ***ib***, se precisaría marcar una distancia ***b*** sobre el eje *x* y luego se haría girar 90º de modo que terminaría siendo un desplazamiento de ***b*** sobre el eje y. Del mismo modo, para lograr la magnitud $\boldsymbol{i^2 b}$ primero haríamos como antes, obteniendo la magnitud ***ib***, y luego se le volvería a aplicar una rotación de 90º. Esto nos llevaría a la identidad importante de que dos rotaciones sucesivas de 90º en el mismo sentido invertirían el desplazamiento *b* en el sentido de *–b*, llegando a la evidente identidad algebraica de que $\boldsymbol{i^2}$=-1. De ese modo, ***i*** no sería más que la raíz cuadrada de -1.

Teniendo en cuenta el exponente complejo y el desarrollo en series de Taylor, lo anterior puede ser desarrollado llegando a la igualdad:

$$\cos q + i \sin q = e^{iq}$$

Obteniendo una representación plana que es una conexión sencilla entre esta y el álgebra representada por la función exponencial. Esta fórmula matemática que Feynmann consideraba una "*joya asombrosa*" y establecida por Euler, puede completarse con otra "*joya asombrosa*" adicional, facilitada por Hamilton:

Teniendo en cuenta exactamente el mismo razonamiento, pero utilizando el factor complejo ***j* para tener en cuenta que estamos trabajando con elementos en el eje *y*** y perpendiculares a este, y el factor complejo ***k*** para cuando trabajamos con elementos en el eje *z* y perpendiculares a este, y volviendo pues a la ecuación de Schrödinger, tendríamos que su expresión en el eje *y* sería:

$$j\mathbf{h}\frac{\partial \Psi_f}{\partial t} = -\frac{\mathbf{h}^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_f}{\partial y^2} + V_0 \Psi_f$$

Con la solución:

$$\Psi_{f_y} = \cos(ky - wt) + j\sin(ky - wt) = e^{j(ky - wt)}$$

Es evidente que podríamos aplicarlo tanto al “eje *z*”:

$$k\hbar\frac{\partial\Psi_f}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_f}{\partial z^2} + V_0\Psi_f$$

Con la solución:

$$\Psi_{f_z} = \cos(kz - wt) + \vec{k}\sin(kz - wt) = e^{\vec{k}(kz-wt)}$$

Ahora bien, teniendo en cuenta que un cuaternión puede representar vectores en el espacio tridimensional R^3 por medio de ***i***, ***j***, y ***k*** como notación del la base del espacio ortonormal de R^3 , los vectores pueden ser como tripletes de números reales (escalares) con la base ortonormal siguiente:

i = (1 ,0 ,0)
j = (0 ,1 ,0)
k =(0, 0 ,1)

Recordemos que un cuaternión puede escribirse como cuaternas de números reales, como elemento de R^4, es decir, que podríamos escribir:

$$q = (q_0, q_1, q_2, q_3)$$

donde q_0, q_1, q_2 y q_3 son simplemente números reales o escalares.

Como indicamos, podemos obtener una forma alternativa de representar un cuaternión, primero tomando su parte escalar q_0 y después tomando su parte vectorial $\vec{q}$ que es un vector ordinario en R^3:

$$\vec{q} = iq_1 + jq_2 + kq_3$$

Y el cuaternión (paravector) sería la suma:

$$q = q_0 + \vec{q} = q_0 + iq_1 + jq_2 + kq_3$$

Si este cuaternión tiene norma 1, entonces:

$$q_0^2 + |\vec{q}|^2 = 1$$

Como sabemos que para cualquier ángulo θ ocurre que

$$\cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$$

Debe existir algún ángulo θ tal que:

$$\cos^2\theta = q_0^2 \quad \text{y} \quad \sin^2\theta = |\vec{q}|^2$$

Este ángulo puede existir únicamente si le aplicamos una restricción en su dominio de modo que satisfaga en general la restricción:

$$-p < q \le p$$

Y de este modo tenemos un ángulo θ asociado con el cuaternión q. Supongamos que definimos un vector unitario $\vec{u}$ que representa la dirección de $\vec{q}$ escribiendo:

$$\vec{u} = \frac{\vec{q}}{|q|} = \frac{\vec{q}}{\sin q}$$

Entonces podemos escribir el vector unitario q en términos del ángulo θ y del vector unitario $\vec{u}$ como:

$$q = q_0 + \vec{q} = \cos q + \vec{u} \sin q$$

Tomando las ecuaciones de Schrödinger aplicadas a cada uno de los ejes, cada una de ellas puede operarse en forma cuaterniónica del siguiente modo:

$$\begin{aligned}
\Psi_{f_x} &= \cos(kx - wt) + i \sin(kx - wt) = e^{i(kx-wt)} = q_{ox} + \vec{q}_x \\
\Psi_{f_y} &= \cos(ky - wt) + j \sin(ky - wt) = e^{j(ky-wt)} = q_{oz} + \vec{q}_z \\
\Psi_{f_z} &= \cos(kz - wt) + k \sin(kz - wt) = e^{k(kz-wt)} = q_{oy} + \vec{q}_y
\end{aligned}$$

La suma de tres cuaterniones da igual a un cuaternión, luego los anteriores darían igual a:

$$\Psi_f = q_{ox} + \vec{q}_x + q_{oy} + \vec{q}_y + q_{oz} + \vec{q}_z = q_{ox} + q_{oy} + q_{oz} + \vec{q}_x + \vec{q}_y + \vec{q}_z = q_0 + \vec{q}_{\vec{r}}$$

Para que se cumplan las condiciones anteriores, el cuaternión resultante tiene que tener módulo 1, para lo cual:

$$\frac{\Psi_f}{|\Psi_f|} = \frac{q_0 + \vec{q}_{\vec{r}}}{\sqrt{q_0^{\,2} + \vec{q}_{\vec{r}}^{\,2}}} = \frac{q_{ox} + q_{oy} + q_{oz} + \vec{q}_x + \vec{q}_y + \vec{q}_z}{\sqrt{\left(q_{ox} + q_{oy} + q_{oz}\right)^2 + \vec{q}_x^{\,2} + \vec{q}_y^{\,2} + \vec{q}_z^{\,2}}} = 1$$

La expresión desarrollada sería:

$$\frac{\cos(kx - wt) + \cos(ky - wt) + \cos(kz - wt) + \hat{i} \sin(kx - wt) + \hat{j} \sin(ky - wt) + \hat{k} \sin(kz - wt)}{\sqrt{\left(\cos(kx - wt) + \cos(ky - wt) + \cos(kz - wt)\right)^2 + \sin^2(kx - wt) + \sin^2(ky - wt) + \sin^2(kz - wt)}}$$

Como tiene módulo 1, deben existir y se pueden obtener los valores del ángulo θ y del vector unitario $\vec{u}$ que cumplen que $q = q_0 + \vec{q} = \cos q + \vec{u} \sin q$. Los cosenos directores del vector $\vec{u}$ serán tales que con respecto del eje de coordenadas definido por los vectores base $\hat{i}$ $\hat{j}$ y $\hat{k}$ serán:

$$\cos\alpha = \vec{u}\cdot\hat{i} = u_1 \qquad \text{y} \qquad \sin\alpha = \sqrt{u_2^2 + u_3^2}$$
$$\cos\beta = \vec{u}\cdot\hat{j} = u_2 \qquad \text{y} \qquad \sin\beta = \sqrt{u_3^2 + u_1^2}$$
$$\cos\gamma = \vec{u}\cdot\hat{k} = u_3 \qquad \text{y} \qquad \sin\gamma = \sqrt{u_1^2 + u_2^2}$$

Como $q = q_0 + \vec{q} = q_0 + \vec{u}\sin\theta$ y

$$q_0 = \cos\theta = \frac{\cos(kx-\omega t)+\cos(ky-\omega t)+\cos(kz-\omega t)}{\sqrt{\left(\cos(kx-\omega t)+\cos(ky-\omega t)+\cos(kz-\omega t)\right)^2 + \sin^2(kx-\omega t)+\sin^2(ky-\omega t)+\sin^2(kz-\omega t)}}$$

haciendo el arcocoseno de la expresión anterior obtenemos el valor de θ y con él podemos tener el cuaternión definido, y con él, la *función de onda unitaria*.

También se puede expresar el cuaternión obtenido en función de los *ángulos de Euler* respecto de los ejes *x*, *y*, *z* y un ángulo de una rotación simple α por medio del *Teorema de Euler*.

La Ecuación de Schrödinger paravectorial cuatrodimensional

Teniendo en cuenta el cuaternión:

$$q = [q_0 \quad q_1 \quad q_2 \quad q_3]^T$$

$$|q|^2 = q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 = 1$$

$$q_0 = \cos(\alpha/2)$$
$$q_1 = \sin(\alpha/2)\cos(\beta_x)$$
$$q_2 = \sin(\alpha/2)\cos(\beta_y)$$
$$q_3 = \sin(\alpha/2)\cos(\beta_z)$$

Siendo α un ángulo simple de rotación y β_x , β_y *y* β_z los cosenos directores que localizan los ejes de rotación. Similar a los ángulos de Euler, se suelen utilizar los ángulos en términos de dinámica de vuelo (y robótica):

β_x , Roll, φ, rotación sobre el eje *x*.
β_y, Pitch, θ, rotación sobre el eje *y*.
β_z, Yaw, ψ, rotación sobre el eje *z*.

Teniendo en cuenta las matrices de rotación, con la matriz ortogonal correspondiente a una rotación con los ángulos de Euler , φ, θ, ψ, y comparando las matrices, podemos obtener los términos:

$$q=\begin{bmatrix}\cos(f/2)\cos(q/2)\cos(y\ /2)+\sin(f/2)\sin(q/2)\sin(y\ /2)\\ \sin(f/2)\cos(q/2)\cos(y\ /2)-\cos(f/2)\sin(q/2)\sin(y\ /2)\\ \cos(f/2)\sin(q/2)\cos(y\ /2)+\sin(f/2)\cos(q/2)\sin(y\ /2)\\ \cos(f/2)\cos(q/2)\sin(y\ /2)-\sin(f/2)\sin(q/2)\cos(y\ /2)\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} f\\ q\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\arctan\dfrac{2\left(q_0q_1+q_2q_3\right)}{1-2\left(q_1^2+q_2^2\right)}\\ \arcsin\left(2\left(q_0q_2-q_3q_1\right)\right)\\ \arctan\dfrac{2\left(q_0q_3+q_1q_2\right)}{1-2\left(q_2^2+q_3^2\right)}\end{bmatrix}$$

Hay que tener en cuenta que existen singularidades en la parametrización con ángulos de Euler cuando el Pitch se acerca a ±90º (“polo norte” y “polo sur”) y que estos casos deben ser tomados con cuidado.

De todo lo anterior, se puede concluir que la ecuación de onda será una expresión:

$$\Psi_f=\cos\left(k\vec{r}-wt\right)+\vec{u}\sin\left(k\vec{r}-wt\right)$$

Conclusiones

Usualmente se ha interpretado la función de onda compleja como una función que no se puede medir con un instrumento ***real***. Tras esta interpretación, en la que no existe nada que sea “imaginario”, todas las variables pueden ser medidas y se observan dos elementos importantes, uno, **un vector unitario** que indica una dirección, que intuitivamente indica un vector de dirección y un ángulo **y las componentes de una onda**. No existe complementariedad, sino conjunción. Esta función, lo que realmente nos está indicando es parte de un “rotor”, como se vio en el artículo anterior, que es otro modo de abordar la ecuación de Schrödinger a la par que una forma de descubrir más aspectos de la *función de onda cuaterniónica*, con interpretación en el mundo REAL, en contraposición a la función de onda compleja, que precisa de interpretaciones probabilisticas.

Bibliografía utilizada.

1. “La Ecuación de Schrödinger”. Julio Gratton. http://www.lfp.uba.ar/Julio_Gratton/cuantica/Cuantica.html
2. Quaternions and Rotations Sequences. Kuipers. Princenton.
3. Clifford (Geometric) Algebras. William E. Baylis, Editor. Birkhäuser.