UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA

Varietats lorentzianes en la representació dels estats estacionaris dels àtoms hidrogenoides en la teoria de de Broglie - Bohm. Uns models heurístics

Autor: Guillem Gómez i Blanch

Director de tesi: Doctor Màrius Josep Fullana i Alfonso

22 juliol 2021

Varietats lorentzianes en la representació dels estats estacionaris dels àtoms hidrogenoides en la teoria de de Broglie - Bohm. Uns models heurístics

Guillem Gómez i Blanch
Universitat Politècnica de València
Departament de Matemàtica Aplicada

Dedicat a la meua família, en particular a la meua dona Maria Dolors Pérez i Pastor, que han hagut de disculpar sovint la meua ocupació en el present treball; a la meua mare i al meu pare, que ja no és entre nosaltres, als qui tant dec.

Agraïments

Haig d'agrair l'esforç i dedicació del director de la tesi, En Màrius Fullana i Alfonso.

Així mateix, m'he beneficiat extraordinàriament amb les discussions amb En Joan Antoni Morales i Lladosa, particularment en geometria riemanniana i relativitat general.

Gràcies també a En Ramon Esteban i Romero, En Vicent Francesc Candela i Pomares, En Josep Vicent Beltran i Solsona i En Pantaleón David Romero Sánchez per les seues observacions enriquidores i el temps esmerçat en elles.

Finalment, vull fer constar que durant la darrera fase de la tesi hem participat dels següents projectes: PID2019-109753GB-C21 i PID2019-109753GB-C22, del Ministeri de Ciència, Innovació i Universitats i el Fons Europeu de Desenvolupament Regional.

Resum

Aquest treball es proposa la representació en una geometria lorentziana de la trajectòria de l'electró en l'àtom hidrogenoide segons la teoria de de Broglie-Bohm (dBB) . Es tracta d'un plantejament heurístic, que persegueix una exploració aproximativa, tot essent conscients de la difícil aplicabilitat de l'equació de camp d'Einstein al nivell descriptiu dels fenòmens individuals en microfísica. Aquests permeten ser tractats per la teoria quàntica de de Broglie-Bohm, que d'altra part manifesta una total coherència amb els resultats experimentals, al mateix nivell que l'habitual representació de Copenhagen.

El nostre punt de partida és la constatació que les òrbites de l'electró en l'àtom hidrogenoide descrites per dBB no comporten pèrdua d'energia electromagnètica, mentre que moviments del mateix tipus en sistemes no atòmics sí que ho fan. Llavors fem la hipòtesi heurística que els electrons en l'àtom es troben en un entorn d'espai-temps corbat i hi descriuen geodèsiques, en què la derivada covariant és nul·la i per tant no s'hi produeix emissió energètica. Es pretén definir una geometria lorentziana coherent amb el comportament de l'electró atòmic segon dBB.

En aquest context s'exposa la correspondència dels espais minkowskians i les varietats lorentzianes en l'àmbit local, formalització del principi que una varietat lorentziana té localment aspecte d'espai minkowskià. Es justifica així la nostra aproximació de fer correspondre en l'àmbit diferencial la trajectòria en ambdues entitats.

La introducció prèvia es completa exposant els conceptes de la teoria dBB corresponents a l'equació de guia (ona pilot) i l'equació quàntica de Hamilton-Jacobi, el potencial quàntic i la seua aplicació a les trajectòries dels àtoms hidrogenoides.

A partir d'aquest punt comença la nostra aportació. Es desenvolupa la descripció de les trajectòries orbitals de la teoria dBB mitjançant una avaluació de les forces presents a l'electró. Es mostra que la força electromagnètica i la força derivada del potencial quàntic posseeixen una resultant centrípeta, que condiciona el gir de l'electró al voltant d'un eix que passa pel protó nuclear. S'evidencia la conveniència d'utilitzar coordenades cilíndriques a causa de la simetria observada en el model atòmic.

A continuació s'empren la formulació en la varietat lorentziana. S'aproxima el moviment orbital de l'electró en coordenades centre de masses, en l'àmbit diferencial, amb el segment equivalent en la varietat lorentziana, corresponent a una geodèsica. S'hi considera la constància del moment cinètic i es pressuposa un model de mètrica habitual en coordenades polars. Hom

arriba així a una condició matemàtica essencial entre les derivades de tres components de la mètrica, el radi de gir (que en el model dBB no es troba limitat) i la longitud reduïda de Compton, parametritzada pel nombre quàntic magnètic. Es mostra que la relació obtinguda és generalitzable a coordenades ortogonals qualssevol. Aquesta condició o teorema permet la formulació de diversos corol·laris molt útils per avaluar les mètriques susceptibles de complir els nostres objectius.

La condició anterior la completem amb alguns requeriments addicionals: que tots els electrons amb el mateix nombre quàntic magnètic han d'admetre el mateix espai-temps, independentment de llur particular radi; que la curvatura escalar ha de ser positiva i que el component contravariant doblement temporal del tensor d'impulsió-energia corresponent a l'equació de camp d'Einstein, representant de la densitat energètica, siga positiva; això com a referència, puix que sabem que l'esmentada equació no és, en rigor, aplicable als sistemes quàntics. L'aplicació d'una equació quàntica de camp d'Einstein, segons models proposats recentment, s'exclou del present estudi. Tanmateix, aquesta és una possibilitat d'extensió del nostre treball en el futur.

La condició fonamental trobada i les addicionals esmentades no permeten determinar analíticament una solució única del problema. En conseqüència, hem de procedir per aproximacions successives, materialitzades en una sèrie de 6 mètriques de la varietat lorentziana.

La mètrica 1 d'aquesta sèrie parteix d'una suposició senzilla sobre el component radial de la diagonal de la mètrica. Aplicant la condició de geodèsica dBB definim completament la mètrica i calculem els connectors de Levi-Civita o símbols de Christoffel de segona espècie i comprovem la circularitat de la congruència de trajectòries (que correspon amb el nombre quàntic que prenem); obtenim el tensor de Ricci, la curvatura escalar i el component energètic del tensor energia - moment. El resultat final no és satisfactori, car la mètrica obtinguda no defineix un espai-temps únic per a tota la congruència d'electrons amb el mateix nombre quàntic; a més, el valor del component energètic del tensor d'energia-impuls és negatiu.

A continuació apliquem un corol·lari del teorema-condició per obtenir una mètrica semblant, però on el radi particular de l'electró no aparega, obtenint la mètrica 2, amb la que repetim l'obtenció dels connectors de Levi-Civita; comprovem la circularitat de l'òrbita, obtenim el tensor de Ricci, la curvatura escalar i el component energètic del tensor d'impulsió-energia. Obtenim així una mètrica que defineix un espai-temps comú a tots els electrons de la congruència de nombre quàntic comú, una curvatura escalar positiva per a determinats intervals de la constant, però que presenta un valor negatiu per a la densitat energètica de referència, representada pel component contravariant doblement temporal del tensor d'impulsió-energia.

Per a obtenir models que proporcionen mètriques capaces de posseir continguts energètics de referència positius, acudim a solucions exactes de l'equació de camp d'Einstein, amb simetries semblants amb el model que ens ocupa. Escollim la mètrica proposada per Lanczos-van Stockum, corresponent a un espai-temps generat per partícules que giren al voltant d'un eix. Aplicant la nostra condició dBB obtenim la mètrica 3. Per a aquesta mètrica obtenim, com en les anteriors, els connectors i comprovem la circularitat de les òrbites, el tensor de Ricci, la curvatra escalar i el tensor contravariant d'impulsió-energia. També s'avalúa el tensor de Riemann. El resultat és notablement satisfactori, encara que les geodèsiques s'adapten només aproximadament a la circularitat requerida per la teoria dBB. La curvatura i la densitat energètica mostren valors massa elevats.

Per tot això modifiquem l'anterior model amb la mètrica 4, canviant un paràmetre, cosa que permet ajustar un valor convenient de densitat energètica; d'aquesta manera, el model s'acosta molt a complir tots els requisits, encara que les geodèsiques compleixen només aproximadament el requisit de circularitat. Convé doncs una aproximació addicional, que emprenem amb les mètriques 5 i 6, síntesis dels models anteriors.

En la mètrica 5 realitzem una síntesi de les mètriques 2 i 3, obtenint una mètrica que admet com a geodèsiques les trajectòries circulars dBB; aquesta mètrica presenta una curvatura i una densitat d'energia de referència positives per a una adequada elecció del paràmetre, així com defineix un espai-temps comú per a totes les trajectòries corresponents al mateix nombre quàntic magnètic. Aquesta mètrica compleix, doncs, els requisits essencials de l'aproximació desitjada.

Finalment, en la mètrica 6, hem realitzat una aproximació addicional tot modificant un paràmetre de la mètrica anterior, semblant al model anterior, amb l'inconvenient d'obtenir una densitat energètica negativa, encara que propera a 0. Això podria ser admissible en el marc de models quàntics de l'equació de camp d'Einstein. D'altra part, trobem un valor positiu de la curvatura, però que tendeix a 0 quan el radi tendeix a infinit.

Cal esmentar que la classificació de Petrov de totes les mètriques exposades és de tipus I.

Arribem així a formular la conclusió final: és possible construir mètriques de varietats lorentzianes en què el moviment dels electrons segons la teoria dBB es pot assimilar aproximadament a geodèsiques. Conseqüentment, la funció de l'ona pilot en la teoria dBB resulta equivalent a l'acció de l'esmentat tensor mètric; és a dir, a la curvatura introduïda en l'entorn de l'electró.

I, en la mesura que aquesta curvatura estiga definida per la presència de l'energia-matèria, estableix una relació dialèctica ona-partícula, que sembla superar el paper merament passiu de la partícula en la teoria dBB. Naturalment, aquestes consideracions tenen un caràcter heurístic, aproximatiu en el millor dels casos. En definitiva, el que hem intentat realitzar és un treball en el camp de la Matemàtica Aplicada amb implicacions físiques de contingut epistemològic especulatiu.

El treball es completa amb unes consideracions històriques i teòriques inicials en què hem insistit en el treball de de Broglie i la deducció de l'equació de Schrödinger i amb unes reflexions finals sobre l'epistemologia de la Física, en què valorem el paper fonamental de la creació de conceptes i hipòtesis, sempre en el marc de la contrastació experimental de llurs resultats.

Els continguts d'aquest treball han estat avançats parcialment en dos articles publicats en la “Revista Mexicana de Física”, referenciats en la tesi. Un treball anterior, publicat en la revista “ Astrophysics and Space Scienceïnicià alguns aspectes relativistes amb certa connexió amb els continguts exposats en aquesta tesi.

Variedades lorentzianas en la representación de los estados estacionarios de los átomos hidrogenoides en la teoría de de Broglie-Bohm. Unos modelos heurísticos.

Resumen

Este trabajo se propone la representación en una geometría lorentziana de la trayectoria del electrón en el átomo hidrogenoide según la teoría de Broglie-Bohm (dBB). Se trata de un planteamiento heurístico, que persigue una exploración aproximativa, siendo conscientes de la difícil aplicabilidad de la ecuación de campo de Einstein al nivel descriptivo de los fenómenos individuales en microfísica. Los cuales permiten ser tratados mediante la teoría cuántica de de Broglie-Bohm, que por otra parte manifiesta una total coherencia con los resultados experimentales, al mismo nivel que la habitual representación de Copenhague.

Nuestro punto de partida radica en la constatación de que las órbitas circulares descritas por dBB en el átomo hidrogenoide no comportan pérdida de energía electromagnética, mientras que movimientos del mismo tipo en sistemas no atómicos sí que lo hacen. Hacemos entonces la hipótesis heurística de que los electrones en el átomo se encuentran en un entorno de espacio-tiempo curvo y describen geodésicas, en que la derivada covariante es nula y por lo tanto no se produce emisión energética. Se pretende definir una geometría lorentziana coherente con el comportamiento del electrón atómico según dBB.

En este contexto se expone la correspondencia de los espacios minkowskianos y las variedades lorentzianas a nivel local, formalización del principio de que una variedad lorentziana tiene el aspecto de espacio minkoskiano localmente. Se justifica así nuestra aproximación de hacer corresponder a nivel diferencial la trayectoria en ambas entidades. La introducción previa se completa exponiendo los conceptos de la teoría dBB correspondientes a la ecuación de guía (onda piloto) y la ecuación cuántica de Hamilton-Jacobi, el potencial cuántico y su aplicación a las trayectorias de los átomos hidrogenoides.

A partir de este punto comienza nuestra aportación. Se desarrolla la descripción de las trayectorias orbitales de la teoría dBB mediante una evalúación de las fuerzas presentes en el electrón. Se muestra que la fuerza electromagnética y la fuerza derivada del potencial cuántico posee una resultante centrípeta, que condiciona el giro del electrón alrededor de un eje que pasa por el protón nuclear. Se evidencia la conveniencia de usar coordenadas cilindricas debido a la simetría observada en el modelo atómico.

A continuación se aborda la formulación en la variedad lorentziana. Se aproxima el movimiento del electrón en su órbita en coordenadas centro de

masas, a nivel diferencial, con el segmento equivalente en la variedad lorentziana, correspondiente a una geodésica. Se tiene en cuenta la constancia del momento cinético y se presupone un modelo de métrica habitual en coordenadas polares. Se llega así a una condición matemática esencial entre las derivadas de tres componentes de la métrica, el radio de giro (que en el modelo dBB no está limitado) y la longitud reducida de Compton, parametrizada por el número cuántico magnético. Se muestra que la relación obtenida es generalizable a coordenadas ortogonales cualesquiera. Esta condición o teorema permite la formulación de diversos corolarios muy útiles para evaluar las métricas susceptibles de cumplir nuestros objetivos.

La condición anterior la completamos con algunos requisitos adicionales: que todos los electrones con el mismo número cuántico magnético deben admitir el mismo espacio-tiempo, independiente de su radio particular; que la curvatura escalar debe ser positiva y que el componente contravariante doblemente temporal del tensor de impulsión-energía o energía-momento correspondiente a la ecuación de campo de Einstein, representante de la densidad energética, sea positivo; como referencia, pues sabemos que dicha ecuación no es, en rigor, aplicable a los sistemas cuánticos. La aplicación de una ecuación cuántica de campo de Einstein, según modelos propuestos recientemente, se excluye del presente estudio. Aunque es una posibilidad de extensión de nuestro trabajo en un futuro.

La condición fundamental encontrada y las adicionales mencionadas no permiten determinar analíticamente una solución única del problema. Por lo tanto, debemos proceder por aproximaciones sucesivas, materializadas en una serie de 6 métricas de la variedad lorentziana.

La métrica 1 de esta serie parte de una suposición sencilla sobre el componente radial de la diagonal de la métrica. Aplicando la condición de geodésica dBB definimos completamente la métrica y calculamos los conectores de Levi-Civita o símbolos de Christoffel de segunda especie y comprobamos la circularidad de la congruencia de trayectorias (que se corresponde con el número cuántico que tomamos); obtenemos el tensor de Ricci, la curvatura escalar y el componente energético del tensor energía-momento. El resultado final no es satisfactorio, pues la métrica obtenida no define un espacio-tiempo único para toda la congruencia de electrones con el mismo número cuántico; además, el valor del componente energético del tensor de impulsión-energía es negativo.

A continuación aplicamos un corolario del teorema-condición para obtener una métrica similar, pero en donde el radio particular del electrón no aparezca, obteniendo la métrica 2, con la que repetimos la obtención de los conectores de Levi-Civita; comprobamos la circularidad de la órbita, obtenemos el tensor de Ricci, la curvatura escalar y el componente energético del tensor de impulsión-energía. Obtenemos así una métrica que define un espacio-tiempo común a todos los electrones de la congruencia de número cuántico magnético común, una curvatura escalar positiva para determinados intervalos de la constante pero que presenta un valor negativo para la densidad energética de referencia, representada por el componente contravariante doblemente temporal del tensor de impulsión-energía.

Para obtener modelos que proporcionen métricas capaces de poseer contenidos energéticos de referencia positivos, acudimos a soluciones exactas de la ecuación de campo de Einstein, con simetrías similares al modelo que nos ocupa. Escogemos la métrica propuesta por Lanczos-van Stockum, correspondiente a un espacio-tiempo generado por partículas que giran alrededor de un eje. Aplicando nuestra condición dBB obtenemos la métrica 3. Para esta métrica obtenemos, como en las anteriores, los conectores y comprobamos la circularidad de las órbitas; el tensor de Ricci, la curvatura escalar y el tensor contravariante de impulsión-energía. También se evalúa el tensor de Riemann. El resultado es notablemente satisfactorio, aunque las geodésicas se adaptan sólo aproximadamente a la circularidad requerida por la teoría dBB. La curvatura escalar y la densidad energética muestran valores demasiado elevados.

Por todo ello modificamos el modelo anterior mediante la métrica 4, cambiando un parámetro, lo que permite ajustar un valor conveniente de densidad energética, con lo que el modelo se acerca mucho a cumplir todos los requisitos, aunque las geodésicas cumplen sólo aproximadamente el requisito de circularidad. Se hace así conveniente una aproximación adicional, que acometemos en las métricas 5 y 6, síntesis de los modelos anteriores.

En la métrica 5 realizamos una síntesis de las metricas 2 y 3, de modo que obtenemos una métrica que admite como geodésicas las trayectorias circulares dBB; esta métrica presenta una curvatura y una densidad de energía de referencia positivas para una adecuada elección del parámetro, así como define un espacio-tiempo común para todas las trayectorias correspondientes al mismo número cuántico magnético. Dicha métrica cumple, pues, los requisitos esenciales de la aproximación deseada.

Finalmente, en la métrica 6, hemos realizado una aproximación adicional modificando un parámetro de la métrica anterior, similar a la realizada en la métrica 4. Encontramos así, tras el correspondiente cálculo, una valoración similar al modelo anterior, con el defecto de obtener una densidad energética de referencia negativa, aunque próxima a 0. Ello podría ser admisible en el marco de modelos cuánticos de la ecuación de campo de Einstein. Por otra parte, encontramos un valor de la curvatura positiva, pero que tiende a 0 cuando el radio tiende a infinito.

Hay que mencionar que la clasíficación de Petrov de todas las métricas expuestas es de tipo I.

Llegamos así a formular la conclusión final de que es posible construir métricas de variedades lorentzianas en que el movimiento de los electrones según la teoría dBB se puede asimilar a geodésicas. Consecuentemente, la función de la onda piloto en la teoría dBB resulta equivalente a la acción de dicho tensor métrico; es decir a la curvatura introducida en el entorno del electrón. Y, en la medida que esta curvatura esté definida por la presencia de la energía-materia, establece una relación dialéctica onda-partícula, que parece superar el papel meramente pasivo de la partícula en la teoría dBB. Naturalmente, estas consideraciones tienen un carácter heurístico, aproximativo en el mejor de los casos. En definitiva, lo que hemos intentado realizar es un trabajo en el campo de la Matemática Aplicada con implicaciones físicas de contenido epistemológico especulativo.

El trabajo se completa con unas consideraciones históricas y teóricas iniciales en que hemos insistido en el trabajo de de Broglie y la deducción de la ecuación de Schrödinger y con una reflexiones finales sobre la epistemología de la Física, en que se valora el papel fundamental de la creación de conceptos e hipótesis, siempre en el marco de la contrastación experimental de sus resultados.

Los contenidos de este trabajo han sido adelantados parcialmente en dos artículos publicados en la "Revista Mexicana de Física", referenciados en la tesis. Un trabajo anterior publicado en la revista "Astrophysics and Space Scienceïnició algunos aspectos relativistas con cierta conexión con los contenidos expuestos en esta tesis.

Abstract

Lorentzian manifolds for the representation of the stationary states of the hydrogenoid atoms en the de Broglie-Bohm theory. Some heuristic models.

This work proposes the representation in a Lorentzian geometry of the trajectory of the electron in the hydrogen atom according to the de Broglie-Bohm theory (dBB). It is a heuristic approach, which pursues an approximate exploration, being aware of the difficulty of the applicability of Einstein's field equation to the descriptive level of individual phenomena in microphysics. Such kind of phenomena can be treated by the quantum theory of de Broglie-Bohm, which on the other hand manifests a total coherence with the experimental results, at the same level as the usual representation of Copenhagen.

Our starting point lies in the observation that the circular orbits described by dBB in the hydrogen atom do not involve loss of electromagnetic energy, while movements of the same type in non-atomic systems do it. We then hypothesize that the electrons in the atom are in a curved spacetime environment and describe geodesics, in which the covariant derivative is zero and therefore no energy emission occurs. It is intended to define a Lorentzian geometry consistent with the behavior of the atomic electron according to dBB.

In this context, the correspondence of Minkowskian spaces and Lorentzian manifolds at the local level is exposed, formalizing the principle that a Lorentzian manifold locally has the appearance of Minkoskian space-time. This justifies our approach of matching the trajectory in both entities at a differential level. The previous introduction is completed by exposing the concepts of dBB theory corresponding to the guide equation (pilot wave) and the Hamilton-Jacobi quantum equation, the quantum potential and its application to the trajectories of hydrogen atoms.

In this point begins our contribution. The description of the orbital trajectories of the dBB theory is developed by an evaluation of the forces that are present in the electron. It is shown that the electromagnètic force and the force derived from the quantum potential have a centripetal resultant, which conditions the rotation of the electron around an axis that passes through the nuclear proton. The convenience of using cylindrical coordinates is evident due to the symmetry observed in the atomic model.

The formulation in the Lorentzian manifold is discussed below. The motion of the electron in its orbit in center-of-mass coordinates, at the differential level, is approximated with the equivalent segment in the Lorentzian manifold, corresponding to a geodesic. The constancy of the kinetic moment

is taken into account and a model of usual metric in polar coordinates is assumed. Thus, it is presented an essential mathematical condition between the derivatives of three components of the metric, the radius of rotation (which is not limited in the dBB model) and the reduced Compton length, parameterized by the magnetic quantum number. It is shown that the obtained relation is generalizable to any orthogonal coordinates. This condition or theorem allows the formulation of several very useful corollaries to evaluate the metrics likely to meet our objectives.

The above condition is completed with some additional requirements: that all electrons with the same magnetic quantum number must admit the same spacetime, independent of their particular radius; that the scalar curvature must be positive and that the doubly temporal contravariant component of the impulse-energy or energy-momentum tensor corresponding to Einstein's field equation, representative of the energy density, is positive; for reference, because we know that such an equation is not, strictly speaking, applicable to quantum systems. The application of an Einstein quantum field equation, according to recently proposed models, is excluded from the present study. Although it is a possibility of extending our work in the future.

The fundamental condition found and the additional ones mentioned do not allow determining analytically a single solution of the problem. Therefore, we must proceed by successive approximations, materialized in a series of 6 metrics of the Lorentzian manifold.

Metric 1 in this series starts from a simple assumption about the radial component of the metric's diagonal. Applying the dBB geodesic condition, we completely define the metric and calculate the Levi-Civita connectors or the equivalent Christoffel symbols of the second kind and check the circularity of the congruence of trajectories (which corresponds to the quantum number we take); then we obtain the Ricci tensor, the scalar curvature and the energy component of the energy-momentum tensor. The final result is not satisfactory, since the metric obtained does not define a single spacetime for the entire congruence of electrons with the same quantum number; in addition, the value of the energy component of the impulse-energy tensor is negative.

Then we apply a corollary of the theorem-condition to obtain a similar metric, but where the particular radius of the electron does not appear, obtaining the metric 2, with which we again compute the Levi-Civita connectors; we check the circularity of the orbit, obtain the Ricci tensor, the scalar curvature and the energy component of the impulse-energy tensor. We thus obtain a metric that defines a spacetime common to all electrons of the common magnetic quantum number congruence, a positive scalar curvature for certain intervals of the constant but presenting a negative value for the reference energy density, represented by the doubly temporal contravariant component of the impulse-energy tensor.

To obtain models that provide metrics capable of having positive reference energy content, we turn to exact solutions of the Einstein field equations, with symmetries similar to the model considered. We choose the metric proposed by Lanczos-van Stockum, corresponding to a spacetime generated by particles rotating around an axis. Applying our dBB condition, we get metric 3. For this metric we obtain, as in the previous ones, the connectors and check the circularity of the orbits; the Ricci tensor, scalar curvature and impulse-energy contravariant tensor. The Riemann tensor is also evaluated. The result is remarkably satisfactory, although geodesics adapt only approximately to the circularity required by dBB theory. Scalar curvature and energy density show values that are too high.

For all this we modify the previous model by means of metric 4, changing a parameter, which allows us to adjust a convenient value of energy density, with which the model is very close to achieve all the requirements, although the geodesics only approximately meet the requirement of circularity. Thus an additional approximation is needed, which we undertake in metrics 5 and 6, synthesis of the previous models.

In metric 5 we perform a synthesis of metrics 2 and 3, so that we obtain a metric that admits as geodesic the circular trajectories dBB; this metric presents a positive curvature and reference energy density for an appropriate choice of parameter, as well as defines a common spacetime for all trajectories corresponding to the same magnetic quantum number. This metric therefore meets the essential requirements of the desired approximation.

Finally, in metric 6, we have made an additional approximation by modifying a parameter of the previous metric, similar to the one made in metric 4. Thus, after the corresponding calculation, we find a value similar to the previous model, with the defect of obtaining a negative reference energy density, although close to zero. This could be permissible in the framework of quantum models of Einstein's field equation. On the other hand, we find a value of positive curvature, but that tends to zero when the radius tends to infinity.

It should be mentioned that the Petrov class of all the metrics exposed is type I.

We thus came to formulate the final conclusion that it is possible to construct metrics of Lorentzian manifolds which reads the motion of electrons according to the dBB theory can be assimilated to geodesics. Consequently, the function of the pilot wave in the dBB theory is equivalent to the action of the corresponding metric tensor; that is, to the curvature introduced into the environment of the electron. And, to the extent that this curvature is defined by the presence of energy-matter, it establishes a wave-particle dialectical relationship, which seems to surpass the merely passive role of the particle in dBB theory. Of course, these considerations are heuristic in nature, approximate at best. In short, what we have tried to do is a work in the field of Applied Mathematics with physical implications of speculative epistemological content.

The work is completed with some initial historical and theoretical considerations especially regarding the work of de Broglie and the deduction of the Schrödinger's equation and with a final reflection on the epistemology of Physics, in which the fundamental role of the creation of concepts and hypotheses is valued, always within the framework of the experimental contrast of their results.

The contents of this work have been partially advanced in two articles published in the "Revista Mexicana de Física", referenced in the thesis. A previous work published in the journal "Astrophysics and Space Scienceïnitiated some relativistic aspects with some connection with the contents exposed in this thesis.

Varietats lorentzianes en la representació dels estats estacionaris dels àtoms hidrogenoides en la teoria de de Broglie - Bohm. Uns models heurístics

Guillem Gómez i Blanch

"La filosofia es troba escrita en aquest immens llibre continuament obert davant els nostres ulls (vull dir l'Univers) però que no es pot comprendre més que si hom s'aplica abans a comprendre'n la llengua i a conéixer els caràcters en què es troba escrit. Està escrit en llengua matemàtica, i els seus caràcters són triangles, cercles i d'altres figures geomètriques, sense els quals és humanament impossible entendre'n un mot."

Galileu Galilei, 1623 *Il Saggiatore.*

"Aquesta hipòtesi es basa en la simple suposició que el món, com a conjunt, és objectivament real i que, tan extensament com nosaltres ara coneixem, pot ser correctament esguardat com a posseint una estructura precisament descriptible i analitzable, d'il·limitada complexitat".

D. Bohm, 1952 *Una interpretació suggerida de la teoria quàntica en termes de variables "amagades", II*

Índex

Capítol 1

Introducció

1.1 Intencionalitat del present treball

La mecànica quàntica segons **de Broglie-Bohm** (dBB) considera com a entitats microfísiques primordials la partícula i l'ona associada i que guia el seu moviment (ona pilot). La seua formulació original per de Broglie parteix de la hipòtesi que a tota partícula correspon un fenomen ondulatori, tot estenent la teoria d'Einstein sobre el caràcter dual de la radiació electromagnètica en l'efecte fotoelèctric. De Broglie va fer confluir la dinàmica de la partícula i de l'ona acompanyant tot arribant a la teoria que hom anomenà d'"ona pilot", perquè en aquesta l'ona, que constitueix un camp físic, guia el moviment de la partícula. Com és sabut, Bohm desenvolupà i perfeccionà aquesta concepció, que avui gaudeix d'un elevat reconeixement com a teoria consistent.

La teoria dBB reprodueix els resultats experimentals, sense necessitat de recórrer a la presència d'un observador extern ni altres premises de la mecànica quàntica segons Copenhaguen. Aquesta té un caràcter estadístic i fenomenològic que, en particular, no permet l'estudi dels fenòmens individuals. I precisament el que volem estudiar en aquest treball són certs fenòmens quàntics individuals; aquesta és una de les raons per la qual hem adoptat el punt de vista de la teoria dBB.

Durant els darrers temps s'han fet diversos desenvolupaments relatius a la teoria dBB. D'una banda, hom ha formulat models que compatibilitzen la teoria dBB amb la Relativitat, tot introduint foliacions temporals de l'espaitemps, que permeten incloure-hi el fenomen no local de l'enllaçament ("entanglement"). D'una altra banda, s'han formulat models on les partícules es mouen en espais corbats, que explicarien les trajectòries i els efectes del potencial quàntic com a causats per la curvatura de l'espai-temps. I per una altra banda, hom ha arribat a presentar models d'una equació de camp d'Einstein que integraria els efectes quàntics.

El present treball s'emmarca en el marc general d'aquests plantejaments, però a un nivell fonamental i amb un propòsit heurístic; tracta d'explorar l'estructura de l'espai-temps en què es mou un electró en un àtom hidrogenoide. Per a fer-ho, parteix de la teoria de de Broglie-Bohm de la Mecànica Quàntica en una varietat dotada de geometria lorentziana.

El comportament d'un electró en un estat estacionari enllaçat, com el que s'experimenta en els àtoms, es troba justificat en la teoria dBB pel guiatge de l'electró per l'ona o, el que és equivalent, per l'acció dels potencials actuants incloent el potencial quàntic. Se'ns planteja aleshores la possibilitat de descriure aquest moviment en el marc d'una varietat espai-temporal lorentziana, del mateix tipus, doncs, que l'utilitzat per la Relativitat General.

Tanmateix, les lleis físiques que podien condicionar la deformació de l'espai-temps, si aquest es produís, no tenen per què ser les de la Relativitat General, com queda dit. Les relacions amb aquesta teoria seran, doncs, només referencials, tot sabent que, en el límit del comportament quàntic, quan un sistema esdevé macroscòpic i sense lligadures quàntiques, són aquestes les lleis que hi regeixen.

No se'ns escapa la gran diferència de marc descriptiu que suposa l'espai-temps pre-relativista i la varietat lorentziana, però teòricament és possible establir-hi una relació a nivell diferencial i creiem que és interessant intentar-ho, sense pretendre necessàriament que els resultats obtinguts corresponguen a la realitat física, la qual cosa només ho podria establir o negar l'experimentació. Per tant, *aquest treball es vol mantindre en el marc de l'aplicació de la matemàtica a la modelització de la hipòtesi física.* Cal dir, però, que una circumstància important al respecte és que, en l'estudi que plantegem, la velocitat de l'electró és baixa en relació a la velocitat de la llum i, en conseqüència, els efectes relativistes són moderats.

Entre els àmbits en què la teoria dBB està rebent interès es troba el de la gravetat quàntica, en la forma de Wheeler-DeWitt i la formulació ADM. La formulació d'aquesta concepció en interpretació dBB es tradueix en prometedors avanços vers equacions quàntiques de camp, ja formulades en la recent literatura. És raonable pensar que, si aquestes equacions s'estableixen sòlidament, hom puga aconseguir una comprensió aprofundida de l'estructura de l'espai-temps i la dinàmica de la matèria-energia en microfísica. Tanmateix, en aquest treball no hem assajat d'utilitzar aquestes equacions. El nostre propòsit ha estat una primera aproximació heurística a la qüestió.

1.1.1 Allò fet

Aquest treball de ***Matemàtica Aplicada*** vol explorar la idea d'utilitzar un marc espai-temporal de **geometria lorentziana** per a descriure les trajectòries orbitals dels electrons en àtoms hidrogenoides segons la teoria de de Broglie-Bohm. **La hipòtesi fonamental és que les dites trajectòries siguen geodèsiques d'una varietat** i que, per tant, la funció del potencial quàntic característic d'aquella teoria, conjuntament amb el potencial electrostàtic, siga equivalent, quant a guia de la partícula, a la curvatura de l'espai-temps corresponent. És clar que, en aquesta hipòtesi, l'acceleració de l'electró -i per tant l'emissió energètica- seria nul·la, el que estaria d'acord amb l'estabilitat de la matèria.

Com queda dit abans, el marc geomètric que hem triat és el de les varietats lorentzianes, per proximitat al marc de la Relativitat General. Les varietats lorentzianes o pseudo-riemannianes es caracteritzen per poder-se assimilar localment a un espai minkowskià: euclidià en la seua secció tridimensional espacial. Això suggereix que hom puga identificar, en l'àmbit diferencial, un segment de trajectòria en l'espai minkowskià i en la varietat lorentziana. Podríem aleshores cercar una varietat lorentziana que expliqués el moviment de la partícula com a geodèsica pròpia i que ens permetès tindre una percepció aproximada i heurística del significat del moviment de l'electró segons dBB en un marc lorentzià.

Aleshores, considerant les trajectòries electròniques dBB dels àtoms hidrogenoides en el marc d'una varietat lorentziana, hem arribat a una condició matemàtica general, que relaciona d'un costat la mètrica i d'altre certs elements de la funció d'ona. En el cas de coordenades cilíndriques, particularment adequades a l'estudi dels àtoms hidrogenoides, **arribem a una formulació matemàtica entre els components de la mètrica, on juga un important paper la longitud de Compton i el nombre quàntic magnètic**. Aquesta formulació ens permet generar diversos models que puguen satisfer el nostre propòsit de representar el moviment electrònic de l'àtom hidrogenoide en una varietat lorentziana.

En principi, qualsevol espai-temps que complira l'esmentada formulació matemàtica, seria un candidat per a establir un marc geometric lorentzià per als estats estacionaris que cerquem. Cal, doncs, introduir referències físiques addicionals per tal de limitar aquesta multiplicitat a mètriques que pogueren, hipotèticament, assimilar-se a situacions reals. Utilitzarem requisits addicionals relatius a la curvatura escalar i la densitat energètica de referència, basada en l'equació de camp d'Einstein.

El següent pas és, doncs, formular models que ens puguen acostar al nostre propòsit, d'una manera iterativa. Una primera aproximació ens proporciona un marc espai-temporal que no és comú per a tota la congruència d'òrbites del mateix nombre quàntic magnètic. Un segon model, millora de l'anterior ens soluciona la deficiència esmentada però no és totalment satisfactòri.

Recorrem aleshores als models basats en les solucions exactes de l'equació d'Einstein. Aquest camí ens porta a un **model de pols** que dona resultats satisfactoris però que no proporciona "geodèsiques dBB", encara que l'aproximació és notable. Una millora del model ens dona ja resultats acceptables per als nostres propòsits.

A continuació fem un pas més, i cerquem models amb solucions exactes de les geodèsiques, inspirats en els anteriors. Aleshores, obtenim espais-temps que sí que tenen com a geodèsiques les òrbites electròniques dBB i que satisfan els diversos criteris que hem establit, entre els quals cal esmentar que el contingut de matèria-energia que donaria una hipotètica equació de camp d'Einstein siga de l'ordre de la present en l'àtom, i que la curvatura no siga negativa. Aquests resultats els considerem una conclusió satisfactòria del nostre treball i ens permet realitzar una avaluació i conclusions.

Ens hem permès de realitzar una petita introducció històrica i una revisió de la situació de les investigacions properes al nostre tema. Així mateix, hem redactat un annex on es fixen algunes posicions epistemològiques que creiem interessant donar a conèixer.

1.1.2 Detall del camí seguit

Comencem, doncs, fent una somera introducció històrica per a emmarcar el nostre tema, estenent-nos fins als desenvolupaments actuals.

A continuació fem una exposició succinta de la dBB aplicada a partícules, amb particular atenció a la descripció dels àtoms hidrogenoides. Considerem també la descripció del potencial quàntic i la força quàntica. Desenvolupem el càlcul del potencial quàntic directament des de la funció d'ona per a l'àtom hidrogenoide.

Desprès d'aquestes passes inicials, introdu¨im la hipòtesi central d'aquest treball: *la identificació del moviment dels electrons en els àtoms hidrogenoides en estat estacionari amb geodèsiques de l'espai-temps d'una varietat, amb acceleració covariant nul·la i per tant amb nul·la pèrdua energètica d'acord amb l'estabilitat observada experimentalment.*

Per a avançar en aquesta hipòtesi representem el moviment dels electrons en àtoms hidrogenoides segons la teoria de de Broglie-Bohm. Ens basem en els conceptes de mètrica equivalent i correspondència de primer ordre per a justificar matemàticament el paral·lelisme entre la representació temporal minkoskiana i la varietat lorentziana.

Els desplaçaments paral·lels entre punts (esdeveniments) de la varietat distants infinitesimalment els tractem mitjançant les connexions de Levi-Civita (idèntics als símbols de Christoffel de segona espècie). Cerquem així unificar les geodèsiques afins característiques del transport paral·lel de vectors i les geodèsiques mètriques, característiques de les distàncies extremals.

Aquest moviment en l'espai euclidià i temps absolut, que hom acostuma a anomenar clàssic, el relacionem a nivell local i diferencial, d'acord amb les propietats de les varietats, amb una trajectòria en l'espai-temps lorentzià, que nosaltres identifiquem amb una geodèsica. Aquesta relació permet un desenvolupament molt important per al nostre propòsit, atenent a les propietats quàntiques fonamentals, particularment la constància del moment cinètic. Arribem així a una condició fonamental per a que certs components de la mètrica puguen establir un espai-temps coherent amb la teoria de de Broglie-Bohm per als esmentats estats estacionaris dels electrons en els àtoms hidrogenoides. D'aquesta condició derivem a condicions simplificades per a casos particulars.

Aquesta condició matemàtica no ha estat possible de completar-la de manera que pogués permetre la determinació exacta de la mètrica a partir de les condicions de partida. Per tant, la situació és que constitueix un condicionament necessari, però en principi múltiples mètriques de la varietat lorentziana hi podrien ésser considerades com a possibles solucions.

En conseqüència, un cop establertes les condicions aplicables a qualsevol mètrica en coordenades cilíndriques, comencem el procés de trobar-ne una compatible als condicionaments matemàtics i físics que hem esmentat. Hi establim un procés iteratiu d'aproximació, que ens portarà a considerar diverses mètriques on, amb cadascuna, intentarem superar les mancances de l'anterior.

En la formulació de cada model, el primer pas és determinar si les seues geodèsiques compleixen amb les condicions generals a què ens hem referit abans, per a complir la teoria de dBB. Aquestes condicions de vegades només es compleixen de manera aproximada. La caracterització matemàtica de la varietat comporta el càlcul dels connectors de Levi-Civita, el tensor de Ricci i la seua contracció (l'escalar de curvatura). De vegades ha estat d'utilitat calcular l'escalar de Kretschmann. Hem utilitzat la determinació de la classificació de Petrov, per a esbrinar el tipus algebraic de varietat.

Referent a l'aproximació heurística a la Relativitat, és interessant determinar, a partir del tensor de Ricci, la curvatura escalar i la mètrica, el tensor d'Einstein i, per tant, el tensor d'impulsió-energia que conté termes identificables amb la densitat de matèria-energia del sistema quàntic. El fet que queden sense determinar en la condició general almenys dos elements del tensor mètric, a més d'eventuals constants que s'hi puguen presentar, fa plausible identificar aquests elements amb la física del sistema quàntic.

En definitiva, per avaluar una mètrica com a candidata a representar el moviment de l'electró en un àtom hidrogenoide, considerarem essencialment tres elements:

- Que les seues geodèsiques siguen compatibles amb la condició matemàtica trobada per a la concepció dBB;
- Que la seua curvatura siga positiva, com a un criteri compatible amb l'estabilitat de les trajectòries;
- Que el contingut energètic, en una comparació amb la solució equivalent de l'equació de camp d'Einstein, siga positiu.

Cal reiterar ací que no utilitzarem al respecte de manera quantitativa els plantejaments basats en les anomenades equacions quàntiques de camp d'Einstein, formulades pels grups de F. i A. Shojai i Golshani així com pel de Dürr, Goldstein, Zanghí i Struyve.

La nostra aproximació a mètriques lorentzianes que descriguen adequadament l'electró hidrogenoide en la teoria dBB el fem en tres passes. **En la primera etapa, considerem models elementals**: el primer en la consideració més elemental, que comporta mètriques quantitativament diferents per a cada valor del radi atòmic i en segon lloc un model que descriu un espai-temps general per a qualsevol radi atòmic, sempre específic del nombre quàntic magnètic.

En la segona etapa aproximativa considerem models basats en solucions exactes de l'equació de camp d'Einstein. Utilitzem models basats en el moviment de pols, concretament el de Lanczos-Van Stockum, on la pols gira al voltant d'un eix.

En la tercera fase fem una síntesi dels dos grups de models anteriors, que finalment ens condueix a aproximacions satisfactòries, incloent-hi geodèsiques, curvatura escalar i contingut energètic. Mostrant així que és possible la representació de les trajectòries de l'electró dels àtoms hidrogenoides en la teoria dBB amb una geometria lorentziana.

Altres models com el de Gödel trobem que ens portarien a conclusions semblants, amb complicacions afegides com haver de considerar una constant cosmològica. També ha estat considerada una mètrica de buit, sense poder arribar a resultats consistents.

1.1.3 Llista de símbols utilitzats

Taula 1.1: **Significat habitual dels simbols utilitzats**

Simbol	**Significat**
$A_{ij}; A^{ij}; A^i_j$	Tensor covariant; contravariant ; mixt
b	Constant: moment cinètic de la unitat de massa
c	Velocitat llum
∂_x	Derivada parcial respecte a la variable x
E	Energia
f	Longitud reduïda de Compton
ϕ	angle polar (coordenada x^2)
g_{ij}	Tensor mètric covariant
Γ^k_{ij}	Connector de Levi-Civita /Simbol de Christoffel de II$^{\text{a}}$ espècie
$\widehat{H}$	Operador de Hamilton
h	Constant de Planck
$\hbar$	Constant reduïda de Planck
L	Moment cinètic
Λ	Constant cosmològica
l	Nombre quàntic azimutal
n	Nombre quàntic principal
∇	Operador nabla; actuant sobre vector: divergència; sobre escalar: vector gradient
ω	velocitat angular
p	Moment lineal
Ψ	Funció d'ona representant del sistema quàntic
q	Càrrega de l'electró
ρ	radi polar (coordenada x^1)
R	Escalar de Curvatura o amplitud de la funció Ψ
R_{ij}	Tensor de Ricci
R_{ijkl}	Tensor de Riemann
S	Fase de la funció d'ona
T	Energia potencial
T_{ij}	Tensor d'impulsió-energia o energia-moment
u	Nombre quàntic magnètic
V	Potencial (elèctric, quàntic, gravitatori)
W	Acció: integral temporal de la lagrangiana

Capítol 2

Una perspectiva històrica

2.1 Un malson en Física

L'estructura dels sistemes quàntics continua essent un desafiament per a la Física, fins i tot en el més elemental dels sistemes, la partícula aïllada, dotada de natura corpuscular i ondulatòria.

Aquesta doble natura està íntimament lligada a la quantització de l'energia, formulada en l'equació de Planck-Einstein:

$$E = h\nu \tag{2.1}$$

Si aquesta la combinem amb la inèrcia de l'energia:

$$E = m_0 c^2 \tag{2.2}$$

podem relacionar un concepte com la massa inert, corpuscular, amb la freqüència del "fenomen ondulatori acompanyant":

$$m_0 c^2 = h\nu \tag{2.3}$$

La comunitat científica, des de principi del segle XX, tractà d'assimilar aquest estat de coses; però, veritablement, encara no ho ha aconseguit amb plenitud a un nivell teòric.

De Broglie establí una relació entre les equacions dinàmiques ondulatòria i corpuscular, a la qual integrà la condició quàntica, tot obtenint una interpretació coherent, la *teoria de l'ona pilot.*

Schrödinger es basà en les idees de de Broglie per plantejar l'equació de funcions i valors propis, molt important en el desenvolupament posterior tant de la mecànica quàntica "ortodoxaçom de l'aproximació posterior de

Bohm. Tanmateix, la interpretació de Schrödinger va excloure el concepte de partícula, d'altra banda difícilment integrable al si del camp ondulatori que constituïa la funció d'ona complexa Ψ. La funció d'ona esdevingué així una entitat matemàtica capaç de donar una interpretació **estadística** dels processos quàntics.

No esmentarem ací, més enllà de l'estrictament imprescindible per als nostres fins, els desacords amb la interpretació ortodoxa de la mecànica quàntica, també anomenada de Copenhaguen, puix que això ens allunyaria del tema en què volem centrar-nos. Esmentem simplement que en aquella no hi ha lloc per a fenòmens individuals en general, ni per a trajectòries de partícules.

Els esforços de de Broglie per integrar la partícula de manera unificada amb l'ona -un camp **físic** en la seua concepció- en tant que solució singular (**teoria de doble solució**) mai no van acabar de prosperar.

Totes les aproximacions als fenòmens microfísics que hem esmentat es realitzaren en el context d'un **espai-temps pla**, fins i tot en les aproximacions relativistes. Tanmateix, això no és en cap manera condicionant a considerar-ne d'altres no plans. Perquè, si acceptem que la matèria-energia és capaç de corbar l'espai-temps a l'escala macroscòpica, perquè no hauria de fer-ho a l'escala microscòpica?

Un camí coherent per a desenvolupar aquest punt de vista és el d'una *concepció geometrodinàmica*. Aquest concepte va ser formulat inicialment per A. Einstein i es refereix a les relacions físiques entre la matèria-energia d'un sistema físic i l'espai-temps que l'envolta; tots dos mantenen una relació d'interdependència. **La matèria-energia condiciona la curvatura de l'espai-temps i l'espai-temps, per la seua curvatura, condiciona l'evolució espai-temporal de la matèria-energia.** En definitiva, es tracta de la possibilitat d'inferir que tal com s'esdevé en l'àmbit macroscòpic, també pot esdevenir en l'àmbit microscòpic.

L'aproximació geometrodinàmica de J. Wheeler des del punt de vista de la mecànica quàntica ortodoxa no contenia la partícula, ni com a solució particular integrada en la solució general, com en el model de doble solució que cercava de Broglie, ni tampoc com a entitat guiada per la funció d'ona, segons el model de l'ona guia, formulada també per de Broglie. Tanmateix, els seus profunds treballs han estat remarcables en el desenvolupament actual de la teoria, concretament per l'equació de Wheeler-DeWitt.

La concepció d'ona pilot de de Broglie, desenvolupada dècades després per D. Bohm, va constituir una teoria basada en la dualitat ona-partícula, que reproduïa tots els resultats de la Mecànica Quàntica "ortodoxaï permetia explicar els fenòmens individuals. Constituïa *de facto* la negació a la impossibilitat d'una tal teoria que pretenia Von Neumann (von Neumann [1955], cap. 4) i també permetia donar una resposta a la paradoxa d'Einstein, Podolski i Rosen en un sentit diferent del realisme local plantejat pels dits autors, puix que la dita teoria presenta un caràcter *no local*, és a dir que els moviments d'una partícula venen condicionats de manera immediata per la situació de les altres que s'hi troben en interacció. Bell va demostrar que dit caràcter no local, o més exactament, **la presència de correlacions entre les partícules** era essencial perquè una teoria pogués reproduir els resultats de la mecànica quàntica, i l'experimentació li ha donat la raó.

Calgué que els físics tornaren a integrar la partícula en la concepció quàntica per a poder avançar en una concepció geometrodinàmica. Les dites aproximacions s'han fet, precisament, des del camp de la concepció de la mecànica quàntica de de Broglie-Bohm. Se n'han realitzat diverses, que comentarem posteriorment; la nostra es caracteritza per inspirar-se en la Relativitat General, en particular per la selecció dels connectors de Levi-Civita, que permeten unificar els conceptes de geodèsiques afins i mètriques.

En aquest treball partim de la concepció dual de la partícula en unió inseparable de l'ona i formulem la hipòtesi que els electrons atòmics descriuen moviments segons geodèsiques de l'espai-temps, -com es deriva de la teoria de de Broglie-Bohm-que es troba deformat per efecte de la formació del sistema quàntic. A partir d'aquesta hipòtesi cerquem una mètrica de l'espai-temps coherent amb aquestes geodèsiques i estudiem les seues implicacions matemàtiques i físiques. En definitiva, es tracta de trobar un espai-temps corbat, les geodèsiques del qual descriguen el moviment de les partícules segons la teoria de de Broglie-Bohm.

Com és sabut, els àtoms que constitueixen la matèria estan constituïts per un nucli carregat positivament i uns electrons, situats en capes externes als nuclis, carregats negativament i, segons la mecànica quàntica en la concepció de de Broglie-Bohm, descrivint trajectòries orbitals al seu voltant, en estats estacionaris (En el cas dels àtoms hidrogenoides, en plans perpendiculars a l'eix de rotació i que no contenen al protó).

Aquests electrons no emeten energia pel fet d'estar girant al voltant dels nuclis, com ho demostra immediatament l'estabilitat d'aquests. Això entra en contradicció amb les previsions de l'electromagnetisme relatives a una emissió d'energia que comportaria una caiguda de l'electró sobre el nucli, en oberta contradicció, doncs, amb l'observació experimental. Aquest fet ha rebut justificacions diverses, entre les quals destaca el corresponent axioma quàntic, unit a la ressonància entre la freqüència de l'ona pilot i la longitud de l'ona corresponent al sistema quàntic considerat.

2.2 Planck i Einstein

A finals del segle XIX, en l'estudi de l'emissió del cos negre, era manifesta la manca de concordança entre les previsions teòriques (Llei de Rayleigh-Jeans) i la realitat experimental. Per a superar aquesta situació, M. Planck va introduir la hipòtesi que la **matèria (en forma de ressonadors elementals) i la radiació només podien intercanviar energia E per quantitats finites, producte de la freqüència ν i l'anomenada posteriorment *constant d'acció de Planck*** h; d'aquesta manera, la unitat d'intercanvi energètic era una mena d'àtom o quàntum d'energia, regit per l'equació:

$$E = h\nu \tag{2.4}$$

Així apareixia en Física el **fenomen de la quantificació de l'energia**. Notem que això constituïa **l'antítesi** de la concepció anterior. Aquesta quantificació va ser utilitzada posteriorment en diversos camps, com ara les calors específiques o la mecànica estadística (Boltzmann). Un ús particularment relacionat amb el desenvolupament de la teoria fou la seua aplicació a l'estudi de l'efecte fotoelèctric per part d'A. Einstein. L'energia cinètica E_0 dels electrons arrancats d'un metall per la radiació era independent de la seua intensitat i linealment dependent de la freqüència de la dita radiació:

$$E_e = h\nu - \phi_0, \tag{2.5}$$

on ϕ_0 és el treball d'extracció del metall. Un augment de la *quantitat* ν arribava a transformar-se en un canvi de *qualitat* a l'absorció energètica. La radiació incident sobre el metall es podia considerar formada per l'agrupació de quàntums o grans energètics; cadascun dels quals portaria una energia proporcional a la seua freqüència i reaccionaria, al seu torn, individualment amb els electrons del metall. Aquesta concepció significava retornar explícitament a concepcions corpusculars de la llum abandonades durant molt de temps (teoria corpuscular de la llum de Newton). Einstein, doncs, va establir fermament el "quàntum de llum": la concepció quàntica de l'energia *electromagnètica* es consolidava fermament.

Cal dir que Einstein evolucionà posteriorment vers un punt de vista que tractava d'unificar l'ona amb la singularitat que suposava la partícula tot integrant-la en un model en què desapareixia com a font del camp. Un argument important al respecte era la dificultat de conciliar l'equació de camp, a derivades parcials i solució continua en l'espai-temps, amb singularitats estranyes o fins i tot amb solucions singulars ([de Broglie, 1955], pag 21). Einstein es distanciava, doncs, d'una concepció dual partícula-ona. Una evolució diferent però relacionada amb aquesta desenvolupà de Broglie, com veurem després.

2.3 Bohr

En el marc de l'aproximació que ens ocupa, cal esmentar que N. Bohr va introduir les idees quàntiques en l'estudi dels sistemes atòmics. Entre les lleis que va formular cal citar la discreció de l'energia de transició entre nivells energètics dels àtoms i les condicions d'estabilitat de les trajectòries dels electrons com a funció de la constant de Planck. Cal dir que aquest model, de gran èxit, va suposar una discrepància *de facto* amb les idees positivistes de l'època(energetistes i fenomenistes), ben oposades als models mecanicistes, que tant havien enfrontat a Boltzmann amb Ostwald i Mach, uns anys abans.

La quantització de l'energia apareix en aquesta interpretació clarament lligada als sistemes estacionaris: **l'energia de trànsit d'un estat quàntic estacionari a un altre està quantitzada**. Notable és, també, l'establiment del **principi de correspondència** entre els sistemes quàntics i clàssics, al capdavall límit als quals els sistemes clàssics han de tendir.

És també remarcable al respecte la seua teoria posterior de la complementarietat (inspirada segons sembla en les teories psicològiques de William James (Holton [1982], p. 143)), segons la qual el fet que no puguen observar-se alhora els aspectes corpusculars i ondulatoris dels fenòmens és una llei de la natura.

Finalment, cal esmentar la seua defensa de les concepcions de la mecànica quàntica front a la "paradoxa EPR"proposada per Einstein, Podolski i Rosen.

2.4 de Broglie

2.4.1 Un principi fonamental de la Mecànica Quàntica

L. de Broglie va fer un pas decisiu en l'extensió de les idees quàntiques de Planck i Einstein, realitzant la **síntesi** entre el paradigma clàssic i la quantificació de l'energia. Inspirat en el treball d'Einstein sobre els quàntums de llum, va postular [de Broglie, 1925] que *a cada partícula material, i en general a qualsevol entitat energètica elemental, corresponia un fenomen ondulatori.* Posà així en correspondència dos conceptes oposats en el nostre esquema conceptual. D'un costat, la partícula, entitat limitada a una regió petita de l'espai-temps; d'un altre, el fenomen ondulatori, amplament dispers en l'espai i el temps. En l'equació:

$$m_0c^2 = h\nu \tag{2.6}$$

veritablement radica el **nucli de la concepció quàntica**. Era evident, doncs, que *la interacció de dues entitats oposades conceptualment, condicionaven el fenomen físic.*

Cercà aleshores com unificar les dues concepcions, la corpuscular i l'ondulatòria. Per a això es fixà en els *principis de mínima acció* (més exactament, acció estacionària) tant per a la partícula com per a la radiació. Aplicant el principi d'acció estacionària de Hamilton a la partícula considerada en l'espai-temps de la Relativitat Restringida, i a la fase de l'ona equivalent, arribà al plantejament del principi de Maupertuis per al quadrivector impulsió-moment J_i i al de Fermat per al quadrivector ona d'univers O_i. El component temporal d'ambdós permet una identificació a partir de $E = h\nu$. Aleshores va concloure que *devia d'existir una relació de proporcionalitat entre el vector d'univers de la partícula (en la formulació de la Relativitat Especial) i un vector característic de l'ona*:

> "El principi de Fermat aplicat a l'ona de fase és identic al principi de Maupertuis aplicat al mòbil; les trajectòries possibles del mòbil són idèntiques als rajos possibles de l'ona"(de Broglie [1925], pàg.56)

Arribà així a la relació entre la quantitat de moviment de la partícula i la longitud d'ona del fenomen ondulatori:

$$p\lambda = h \tag{2.7}$$

en el marc de la seua tesi. Langevin, consultat per de Broglie sobre el seu treball, posà la tesi de de Broglie en coneixement d'Einstein, qui en quedà molt favorablement impressionat i respongué a Langevin *"Er hat eine Ecke der großen Schleiers gelüftet"* (Ell ha aixecat un cantó del Gran Vel) [de Broglie, 1955]. Einstein denotà la rellevància de la tesi de de Broglie a la comunitat científica, en particular a Schrödinger, qui hi va trobar la seua inspiració per al seu treball, que li conduiria a la seua famosa equació de valors i funcions pròpies.

2.4.2 Teoria de l'ona pilot

De Broglie començà a treballar immediatament en una concepció de síntesi, que desenvoluparia posteriorment com a "teoria de la doble solució"(que comentem més endavant); però urgit per Lorentz per a presentar una ponència amb ocasió de la famosa V^a Conferència Solvay presentà l'estat de les seues investigacions sota la forma "simplificada", important per als nostres propòsits, d'"ona pilot". L'equació de guiatge de la partícula responia a l'equació, amb clares ressonàncies de la mecànica analítica:

$$\vec{v} = \frac{\vec{\nabla} S}{m} \tag{2.8}$$

Puix que arribà a l'expressió:

$$\vec{v} = -c^2 \frac{\vec{\nabla} S}{\frac{\delta S}{\delta t}}, \tag{2.9}$$

on S és assimilable a una **acció**; la seua derivada respecte al temps és l'energia, la qual cosa ens condueix a l'equació de guiatge tal com és utilitzada en la posterior interpretació de Bohm:

$$m\vec{v} = \vec{\nabla} S \tag{2.10}$$

L'aproximació de Bohm coincideix substancialment amb la concepció de de Broglie d'ona pilot, perfeccionant-la i portant-la a les seues conclusions lògiques.

En la citada conferència Solvay la teoria de l'ona pilot de de Broglie va ser qüestionada per Pauli i no va ser explícitament defensada per Einstein; trobant-se a més amb l'hostilitat dels defensors de la concepció estadística: Bohr, Heisenberg, Dirac i Pauli. Tanmateix Lorentz va mostrar-se partidari de representacions realistes de la Física, en l'àmbit espai-temporal.

2.4.3 Teoria de la doble solució. Una reflexió sobre el significat físic i les dificultats matemàtiques

Com és sabut, després de la seua presentació en l'esmentada conferència Solvay, de Broglie abandonà les seues reflexions sobre la síntesi partícula-ona que ell batejava com a interpretació de la doble solució durant uns 25 anys. Aquest model va ser reprès posteriorment, però no ha arribat a conclusions definitives [de Broglie, 1987]. Tanmateix cal considerar-lo pel que significa de propòsit teòric.

De Broglie estava profundament influït per les idees físiques d'Einstein. La concepció que ambdós compartien li donava un paper fonamental al concepte de "camp"en la descripció fonamental de la realitat física. La concepció de de Broglie hi era propera a la d'Einstein. Però per a de Broglie, *la partícula representava una singularitat, una solució singular que s'havia* *d'integrar amb la solució regular del camp. Es tractaria d'acoblar a la solució general una solució singular mòbil que posseïra les mateixes línies de corrent que la de la solució regular; amb això, la singularitat mòbil seguiria una de les línies de corrent.*

Aquesta concepció planteja doncs una mena de *fusió* entre l'ona i la partícula.

2.5 El punt de vista d'Einstein sobre la dualitat ona-corpuscle

El punt de vista d'Einstein sobre aquesta qüestió queda expressat en alguns escrits. Per exemple, criticava la teoria de Maxwell-Lorentz tot dient (Einstein [1952], pag. 133):

"La combinació de la idea d'un camp continu amb la de punts materials discontinus en l'espai apareix com a contradictòria. Una teoria coherent del camp exigeix que tots els elements que hi figuren siguen continus, no solament en el temps, ans també en l'espai i en tots els punts de l'espai. D'ahí deriva que la partícula material no té lloc com a concepte fonamental en una teoria de camp."

i en altre lloc (Einstein [1952], pag. 86):

"El que em sembla cert, és que no cal que hi haja, en els fonaments d'una teoria coherent del camp, un concepte qualsevol concernent als corpuscles. Tota la teoria ha de basar-se únicament sobre equacions de derivades parcials lliures de singularitats".

Coneixem també el punt de vista d'Einstein al respecte per la descripció que en va fer de Broglie, qui refereix (de Broglie [1955]) que la concepció d'Einstein, accentuada en la seua maduresa, consistia en què les partícules havien d'integrar-se totalment en la descripció del camp.

Així doncs, la funció que descriuria el camp hauria de tenir un pic de gran intensitat allà on estiguera la partícula, que quedaria integrada en la solució general d'una equació clàssica amb derivades parcials. El camp es traduiria matemàticament en magnituds que satisfarien certes equacions amb derivades parcials, variant contínuament en l'espai i el temps. Aquestes magnituds contínues en l'espai i el temps no serien coherents, des d'aquest punt de vista, amb les singularitats que significaven les fonts del camp, és a dir, les partícules.

En la concepció esmentada, la partícula desapareixeria en el marc d'una teoria de camp únic.

2.6 Una concepció dialèctica de la dualitat ona-partícula.

Tant el plantejament d'Einstein com el de de Broglie presenten notables dificultats matemàtiques. Es tracta de models que cerquen fusionar la particula i l'ona en una mateixa descripció matemàtica. Tot i l'enorme interés d'aquest plantejament, volem adoptar ací un model dual partícula-ona, més en la línia de la teoria de l'ona pilot de de Broglie-Bohm.

El que volem explorar en aquest treball és la concepció segons la qual la partícula exerceix el paper de *font activa* del camp i que el fenomen ondulatori és la seua contrapartida *passiva* en l'espai-temps que l'envolta, **representant el context o sistema en qué la partícula evoluciona**. En efecte, és una immediata constatació experimental que la partícula, quant a les seues propietats com a tal, romà constant independentment de trobar-se en un sistema físic o un altre; tanmateix, l'ona és específica del tipus de sistema en què la partícula es troba.

En aquesta concepció, tant la partícula com l'ona tenen una existència real, en l'espai-temps d'una varietat de Lorentz. El camp representa l'efecte d'una partícula sobre una altra, mediatitzada per les ones corresponents. La dinàmica de l'ona-partícula ve condicionada per la interacció d'aquestes entitats "contràries".

Aquesta coexistència de magnitud activa i camp està amplament estesa en Física. Considerem per exemple la llei de Gauss del camp elèctric $\vec{E}$ creat per una distribució de càrrega de densitat ρ_e en un medi de constant dielèctrica ϵ:

$$\nabla\vec{E} = \frac{\rho_e}{\epsilon} \tag{2.11}$$

o la llei de Poisson del camp gravitatori $\vec{g}$ creat per una distribució de massa ρ, sent G la constant de gravitació universal:

$$\nabla\vec{g} = -4\pi G\rho \tag{2.12}$$

que inspirà l'equació de camp d'Einstein:

$$R_{ij} - \tfrac{1}{2}Rg_{ij} = \tfrac{8\pi}{c^4}T_{ij}$$

En tots els casos esmentats (i molts d'altres que es presenten a la Física) trobem a una part de l'equació la magnitud activa (el tensor d'impulsió energia en el cas de l'equació de camp d'Einstein, la densitat elèctrica i màssica en les equacions de Gauss i Poisson respectivament) i en l'altre l'efecte d'aquesta magnitud activa sobre l'entorn espai-temporal. La font del camp queda equilibrada dinàmicament per un moviment en l'espai-temps, que constitueix l'ona. Podríem doncs considerar l'ona com la "determinant negativa"de la partícula, o aquesta la "determinant positiva"d'aquella, representant a l'entorn o sistema en què es troba inclosa i extenent-se, en darrer extrem, fins més enllà del sistema (puix que no existeixen sistemes rigorosament aïllats- fins a tot l 'Univers. Aquest punt de vista, creiem, pot tenir interès per a descriure la realitat física.

I si les extensions de la gravetat quàntica a la formulació dBB en forma de partícules són consistents, com en els treballs recents que comentarem indiquen, arribarem a la conclusió que la concepció dialèctica es pot estendre plenament a l'àmbit quàntic.

Al nostre entendre, **la representació de la realitat física com la presentació conjunta d'una part activa i una altra passiva no resulta quelcom a evitar ans la manifestació d'una tendència general de la Natura de presentar parells d'elements oposats, la dinàmica recíproca dels quals constitueixen (i expliquen) el moviment real.**

En tot cas, la categoria o concepte fonamental partícula i la d'ona associada les considerem superades pel concepte d'ona-partícula, tot formant una unitat indestriable. És una situació semblant amb la d'espai-temps, que formen un concepte fonamental nou, diferent del parell de conceptes independents de l'espai i el temps de la Física pre-relativista. En aquest sentit, hom pot demanar-se si, quan parlem de la distància entre dues partícules enllaçades, no estem oblidant que el concepte distància ací no té en compte que el parell de partícules formen un conjunt indestriable i la funció d'ona és comuna a totes dues.

La situació d'enllaçament entre partícules, com esdevé en l'àtom d'hidrogen o les experiències EPR, es caracteritzen per una funció d'ona de conjunt no factoritzable i, en conseqüència, no tractables com a entitats separades o independents. Es manifesten plenament els comportaments no-locals i per tant, la Relativitat no s'hi pot aplicar. Per tant, **des del nostre punt de vista no existeix contradicció entre la localitat que propugna la Relativitat i l'enllaçament que presenten els sistemes quàntics.**

La concepció dialèctica a què ens hem referit té, al nostre entendre, un profund sentit en la comprensió de la natura. S'hi distingeixen tres grans lleis, que enunciarem succintament:

- Llei d'interpenetració de contraris: conceptes contraris que interactuen, determinant el moviment real. En el nostre context distingiríem la interacció ona-partícula, o la de l'espai-temps amb la matèria-impuls en la Relativitat General.

- La transició de la quantitat en qualitat, aplicable als salts quàntics.
- Llei de la negació de la negació: el moviment d'evolució des d'una situació a una altra, continguda potencialment en l'anterior situació. Té una contrapartida en la metodologia científica: la comprensió dels fenòmens a través del procès de tesi, antítesi i síntesi.

  A més, la **categoria de totalitat** hi és fonamental per entendre l'evolució dels elements del conjunt.

En aquest treball considerarem fonamentalment els plantejaments dialèctics que deriven o s'inclouen en la primera llei.

2.7 Schrödinger

E. Schrödinger es basà en els treballs de De Broglie per a aprofundir en el poder descriptiu de la naixent teoria quàntica. Degut a la relació de la seua deducció d'equació d'ones amb alguns plantejaments d'aquest treball la considerarem amb un cert detall.

A diferència de de Broglie, qui sempre adoptava plantejaments de Relativitat Especial, Schrödinger es limità a un plantejament no relativista.

En ([Schrödinger, 1926a]), parteix de la consideració d'un sistema mecànic conservatiu general, és a dir no es limita, en principi, als sistemes quàntics. Descriu aquest sistema mitjançant les coordenades de fases y una mètrica "no euclidiana" que podriem qualificar com a pròpiament riemanniana. Schrödinger no considera explícitament el temps com a dimensió de l'estructura definida. (El fet de no considerar lligadures dependents del temps fa que es puga considerar un espai independent del temps, on aquest únicament entra com a paràmetre general, a la manera del temps absolut.).

En aquest espai de les fases, q_k, planteja l'equació de Hamilton-Jacobi:

$$\partial_t W + T(q_k, \partial_{qk} W) + V(q_k) = 0, \tag{2.13}$$

on W és l'acció, T l'energía cinètica funció de les coordenades i els moments lineals, $\partial_{qk} W$, i V l'energia potencial. Suposa una dependència de l'acció W de la forma:

$$W = -Et + S(q_k), \tag{2.14}$$

que constitueix un desacoblament de la part dependent del temps i de la de les variables de fase. Amb això l'equació de Hamilton -Jacobi proporciona immediatament:

$$2T(q_k, \partial_{qk} W) = 2(E - V), \tag{2.15}$$

aleshores ***introdueix una mètrica no euclidiana en l'espai de les fases mitjançant l'energia cinètica***. El propòsit, com veurem, és fer intervindre les representacions contravariant i covariant de la geometria per a l'anàlisi. L'interval diferencial que defineix és (formulant l'energia cinètica en funció de les velocitats, en lloc de fer-ho en funció dels moments):

$$ds^2 = 2\bar{T}(q_k, \dot{q_k})dt^2 = 2(E - V), \tag{2.16}$$

que en realitat és una forma lineal dels diferencials de les coordenades de fase que, tenint en compte $\dot{q_k}$, tenen caràcter contravariant, dq^k.

Schrödinger doncs, parteix del sistema físic S, descrit per les coordenades q_i que defineix l'espai de les fases, i hi introdueix una mètrica basada en l'energia cinètica que, al nostre entendre, li confereix estructura de **varietat pròpiament riemanianna**, on el temps és absent de manera explícita, de la forma:

$$ds^2 = 2\bar{T}dt^2 = a_{ij}dq^i dq^j \tag{2.17}$$

i on el vector velocitat $\vec{v}$ del punt fase M, de coordenades q^i té com a components contravariants:

$$v^i = \frac{dq_i}{dt} \tag{2.18}$$

i components covariants:

$$v_i = a_{ij}\frac{dq_i}{dt} = \partial_{q_i}(2\bar{T}) \tag{2.19}$$

Aquest mètode, que Schrödinger afirma prendre de Hertz,([Schrödinger, 1926a], pàg.491] és descrit actualment com a la dotació d'estructura de **varietat pròpiament riemanniana** a l'espai de fases d'un sistema mecànic S amb lligadures holònomes ([Lichnerowicz, 1968], pàg. 165).

A mode il·lustratiu podem representar explícitament (2.16) per al cas elemental d'una partícula lliure en coordenades cartesianes:

$$ds^2 = m(\dot{q}^1)^2dt^2 + m(\dot{q}^2)^2dt^2 + m(\dot{q}^3)^2dt^2 = m(dq^1)^2 + m(dq^2)^2 + m(dq^3)^2 \tag{2.20}$$

Després d'introduir aquesta mètrica, remarca Schrödinger, qualsevol raonament "espacial"en q^k tal com angle entre línies, acció d'operadors diferencials com ara gradient o laplaciana, etc., s'han de fer tenint en compte el citat element de línia.

La deducció continúa tot remarcant que en la forma lineal (2.16), els coeficients $2\bar{T}$ formen el tensor covariant fonamental, com apareix explicitament a (2.16). Però, en la mètrica definida, el **gradient** és la versió covariant de la velocitat, vector contravariant. Aleshores, podem identificar $2T(q_k, \partial_{qk}W)$ com a la corresponent forma fonamental contravariant, les variables de la qual són les $\partial_{qk}W$, que constitueixen els components del gradient de W. Això li permet expressar T en funció de $\partial_{qk}W$ i escriure (2.16), *en la mètrica considerada*:

$$2\bar{T}(q_k, \dot{q_k})dt^2 = (\nabla_{qk}W)^2 \tag{2.21}$$

i, en conseqüència:

$$(\nabla_{qk}W)^2 = 2(E - V) \tag{2.22}$$

El raonament vers l'equació d'ones prossegueix estudiant el moviment en el temps (absent de manera explicita en la mètrica) d'una superfície $W = constant$, o "velocitat"de fase, que permet calcular els desplaçaments diferencials ds i així poder plantejar els principis de mínim de Fermat i Maupertuis de manera semblant a com va fer-ho de Broglie en la seua cèlebre tesi. La velocitat de fase cal considerar-la ací de manera especialment acurada, puix que **no representa la velocitat de cap moviment de la partícula en l'espai geomètric real,** ans de l'ona en l'espai de les fases, com ja havia estudiat de Broglie en la teua tesi. Naturalment, el "movimentçitat no pot ser el de la partícula en l'espai tridimensional, en què W, acció, *no és pas constant, ans va incrementant-se contínuament amb el temps.*

Fins ací el raonament és independent del caràcter clàssic o quàntic del sistema mecànic. A continuació Schrödinger planteja trobar per a W solucions trigonomètriques, on l'argument d'aquestes continguera la **relació energia-freqüència de Planck-Einstein** $\nu = \frac{E}{h}$ i arriba a formular finalment l'equació d'ones, per a estats estacionaris, en la forma:

$$\nabla^2\Psi + \frac{2}{\hbar^2}(E - V)\Psi = 0, \tag{2.23}$$

amb les operacions diferencials d'acord amb l'element de longitud (2.16).

L'equació dependent del temps, amb Ψ complexa, és obtinguda suposant per a $\Psi(\vec{r}, t)$ la forma ondulatòria ([Schrödinger, 1926b]):

$$\Psi(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r})e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \qquad (2.24)$$

i eliminant E per derivació. L'equació d'ona, tenint en compte l'element de línia (2.16), adquireix la forma:

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t) \qquad (2.25)$$

Aquesta és, com sabem, l'equació d'ona de Schrödinger. Fins ací mena un procés deductiu gens trivial que començà en l'esforç de de Broglie per acostar les aproximacions de mínima acció com a ona i com a partícula al què ens hem referit anteriorment.

Ens hem estès en recórrer la deducció de Schrödinger per a remarcar tant l'enllaç amb la prèvia teoria de de Broglie com l'elaboració teòrica, molt allunyada d'una "feliç idea". **Resulta estrany que, tant en l'aproximació habitual de la mecànica quàntica com en la teoria dBB, es tracte l'equació de Schrödinger com a un "axioma"o un "postulat". En realitat, l'equació de Schrödiger s'hauria de considerar com una baula de la cadena lògica que parteix de l'equació de Planck-Einstein** $E = h\nu$ i segueix amb la dualitat ona-partícula de de Broglie. I veurem que constitueix, al seu cop, un element fonamental en la fonamentació de la teoria de de Broglie-Bohm.

L'equació d'ones de Schrödinger és una síntesi de les concepcions ondulatòria i corpuscular, en línia d'allò que de Broglie cercava, però limitada a la **funció general**, sense cap solució "singular"o estructura semblant que pogués representar la partícula. És, doncs, una equació general, aplicable a qualsevol partícula individual assignable al mateix *estat* descrit per Ψ.

Schrödinger desplaçà el protagonisme de les trajectòries de les partícules a les propietats del sistema mitjançant les propietats de l'ona acompanyant. De fet, la partícula és rebutjada com a entitat que en un moment donat tinga una posició precisa a l'espai ([Schrödinger, 1926a], pag. 508) tot limitant-se a un 'punt imatge' auxiliar, sense contingut físic. Respecte al sentit físic de l'ona, Schrödinger l'assimilava a algun tipus de densitat energètica distribuïda espacialment.

Altres conclusions de Schrödinger quant al tema que ens ocupa són semblants a les de de Broglie, com ara la coincidència de la velocitat de grup (d'un "paquet d'ones") amb la de la partícula (Schrödinger parla de punt imatge) i la conseqüent coherència de fase en el dit moviment.

Com a puntualització final: les equacions de valors i vectors propis de Schrödinger es refereixen al camp complex Ψ comú a qualsevol partícula que estiga en un determinat estat, descrit per Ψ. Són doncs equacions genèriques que permeten deduir les corresponents magnituds físiques del sistema, com ara nivells energètics i densitats de probabilitats de presència.

L'equació d'ona de Schrödinger té un paper central en la teoria de de Broglie-Bohm i, per tant, en el nostre treball.

2.8 Born

La reflexió de Born sobre la relació entre funció d'ona i probabilitat és d'una gran rellevància en l'estructura teòrica de la interpretació de l'ona pilot i de la mecànica quàntica en general.

La funció d'ona que resulta de la resolució de l'equació de Schrödinger queda indeterminada pel que fa a l'amplitud. Donada una solució, el seu producte per una constant no nul·la també seria solució. Born va donar-ne la següent interpretació: si normalitzem l'amplitud de l'ona de manera que la seua integral en tot l'espai siga la unitat, el seu valor al quadrat R^2 en un punt és interpretable com a una densitat de probabilitat, ρ_p: repetint experiències amb partícules que pertanyeren al mateix estat trobaríem una reiteració de resultats coherents amb aquesta hipòtesi. La probabilitat de localitzar experimentalment la partícula en un volum petit, ΔV, vindrà donada per:

$$P = \rho_p \Delta V = R^2 \Delta V \tag{2.26}$$

Aquesta interpretació és coherent amb la interpretació de l'ona pilot. En efecte, en aquesta, com veurem després, partim de l'expressió de la funció d'ona en forma polar:

$$\Psi = Re^{i\frac{S}{\hbar}} \tag{2.27}$$

i substituïm Ψ en l'equació de Schrödinger (2.25), el que ens condueix a les dues equacions:

$$\partial_t S + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R}{R} = 0 \tag{2.28}$$

$$\partial_t R^2 + \nabla \cdot (\frac{R^2 \nabla S}{m}) = 0 \tag{2.29}$$

Considerem la primera equació, (2.28). En el límit clàssic $\hbar \to 0$, obtenim una equació de Hamilton-Jacobi, amb:

$$\vec{p} = \nabla S \tag{2.30}$$

L'esquema és consistent també en el context quàntic; en aquest cas, el potencial actuant sobre la partícula hi és:

$$V'(\vec{r}) = V(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R}{R} \tag{2.31}$$

És a dir, al potencial "clàssicçal afegir-li'n l'anomenat "potencial quàntic":

$$V_Q(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R}{R} \tag{2.32}$$

L'equació (2.30) la reconeguem com a l'equació de guiatge de de Broglie, paper que també juga en la interpretació de Bohm, expressable així:

$$\vec{v} = \frac{\nabla S}{m} \tag{2.33}$$

La seua integració ens proporcionarà les equacions horàries de la partícula, sempre que li donem unes coordenades inicials; l'eliminació del temps entre elles ens donara les equacions de la seua trajectòria. Naturalment, per definir la trajectòria no n'hi ha prou amb la funció d'ona, ens cal especificar la seua posició inicial.

Per una altra banda, l'equació (2.29) és interpretable, amb les connotacions que després descriurem, com a expressió del corrent de probabilitat. En efecte, remarquem que R està definida excepte un factor de proporcionalitat. Si assumim, amb Born, que R^2 es pot normalitzar a 1 en tot l'espai, $P = R^2$ té el sentit de densitat de probabilitat. Aleshores, tenint en compte l'equació de guiatge (2.30), podem escriure l'equació (2.29) com a:

$$\partial_t P + \nabla.(Pv) = 0, \tag{2.34}$$

és a dir, l'expressió de la conservació de la probabilitat.

L'equació descriptiva de la trajectòria es mostra com a una equació del tipus de Hamilton-Jacobi, amb un terme addicional en el potencial (que hom anomena potencial quàntic), funció del quocient de la laplaciana de l'amplitud i l'amplitud mateixa. Aquests fets impliquen un **comportament no local de l'electró**, per condicionar la seua trajectòria per magnituds dependents de la resta del sistema atòmic.

Aquesta concepció de Bohm es va desenvolupar uns anys més tard pels seus deixebles i el seu col·laborador Hiley. En particular, hom desenvolupà

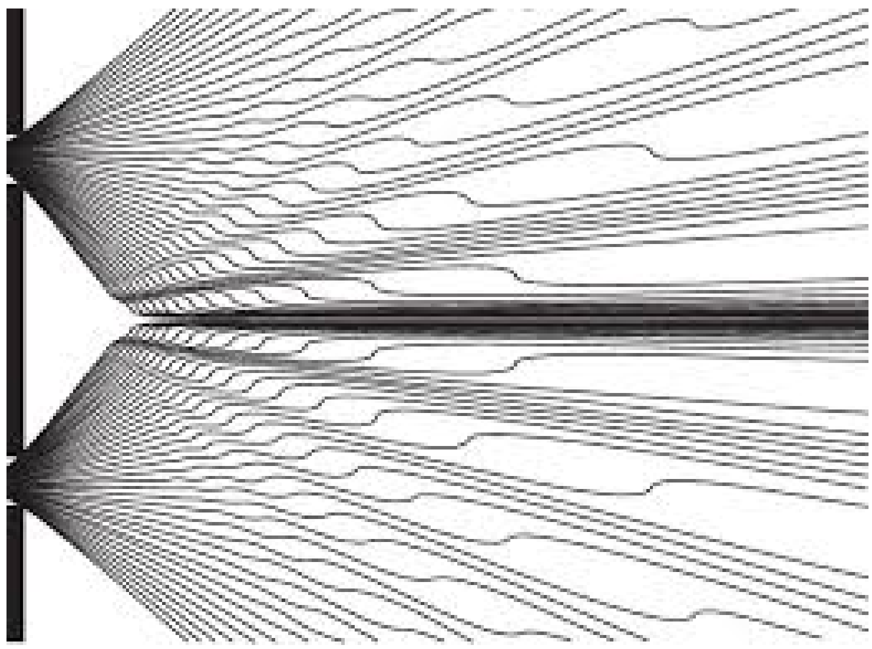

Figura 2.1: Simulació informàtica de les trajectòries en l'experiment de la doble escletxa, d'una font situada a l'esquerra, formada per partícules amb condicions inicials lleugerament variants. A la part dreta es formarien les conegudes figures d'interferència. Segons Phillippidis, Dewney i Hiley

un model assistit per ordinador de les trajectòries dels electrons en l'experiment de la doble escletxa ([Philippidis and Hiley, 1979]) (Figura 2.1). És així que es reprèn l'interés pel model causal o de de Broglie-Bohm i la formulació de models quàntics que consideren la trajectòria de les partícules.

Una puntualització final: la funció de guia que la funció d'ona exerceix sobre la partícula evidencia una diferència de natura amb la funció d'ona com a representant de la probabilitat estadística. Altrament caldria reconèixer a una magnitud adimensional com la probabilitat el paper d'un camp físic.

2.9 Bohm

Les contribucions a una concepció física que integrés el concepte d'ona i partícula s'interromperen entre finals dels anys 20 y principis del 50 del passat segle XX. Sense conéixer inicialment el treball de de Broglie ([Bohm, 1951a]), D. Bohm reprèn la teoria de l'ona pilot i l'estèn, entre altres conceptes, al xoc inelàstic, argument en contra de Pauli enfront de de Broglie en l'abans esmentada V^{a} Conferència Solvay, així com a [Bohm, 1951b] la teoria de la mesura, l'experiment d'Einstein, Podolski i Rosen entre altres conceptes.

Bohm comença la seua interpretació tot expressant la funció d'ona complexa en forma polar, mitjançant dues funcions reals R, amplitud, i S, fase:

$$\Psi = Re^{i\frac{S}{\hbar}} \tag{2.35}$$

Substituint Ψ en l'equació de Schrödinger (2.25), com ja hem avançat anteriorment, obté dues equacions (2.28, 2.29) :

$$\partial_t S + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R}{R} = 0 \tag{2.36}$$

$$\partial_t R^2 + \nabla \cdot (\frac{R^2 \nabla S}{m}) = 0 \tag{2.37}$$

Aquest desglossat de les dues equacions, tanmateix acoblades, permet distingir la part que desenvolupa predominantment l'aspecte corpuscular i la que desenvolupa predominantment l'aspecte ondulatori. En efecte, l'equació (2.28) es pot considerar com a una equació de Hamilton Jacobi quàntica, amb l'aparició d'un potencial quàntic al costat del potencial elèctric; mentre que l'equació (2.29) en desenvolupa l'avaluació en tot l'espai-temps de l'amplitud R tenint en compte la velocitat de la partícula, i és assimilable a una equació de continuïtat de la densitat de probabilitat.

L'objecte quàntic se'ns presenta doncs com a una inextricable unió de partícula i ona. En aquesta dialèctica unió de contraris, la partícula es descriu en un lloc definit en l'espai-temps, mentre que l'ona s'estèn sense límits en l'espai-temps.

Desenvoluparem aquests conceptes al capítol següent.

2.10 Bell

Respecte a l'anàlisi dels fonaments de la mecànica quàntica ha estat molt remarcable l'obra de Bell. El seu punt de vista epistemològic és realista, en certa manera en la tradició d'Einstein en la seua etapa de maduresa; tanmateix, les conclusions dels seus treballs mostren que el realisme local que Einstein propugnava no coincidia exactament amb les previsions estadístiques de la Mecànica Quàntica. I tanmateix no compartia els punts de vista positivistes de Bohr.

A Bell devem, en 1964, una rigorosa crítica de la concepció de von Neumann contra les "variables amagades", així com la puntualització sobre l'abast dels arguments al respecte de Jauch i Piron d'un costat i de Gleason per un altre (Bell [1966]).

La contribució més important al nostre tema és la seua anàlisi de la paradoxa Einstein-Podolski-Rosen ([Bell, 1964]), que ha permés l'experimentació al respecte i la conclusió sobre que la proposta EPR no era el que es presentava en la realitat experimental. Aquesta paradoxa plantejava el "Gedankenexperiment"de dues partícules enllaçades que es separen en direccions oposades dirigint-se vers dos instruments de mesura distants. Mesurant la propietat d'una de les partícules (l'espí de l'electró o la polarització del fotó) podem saber la corresponent propietat de l'altre, el que demostra que estava determinada; si haguéssem fet el càlcul segons la Mecànica Quàntica només hauríem obtingut una propietat; el que demostraria que la Mecànica Quàntica és incompleta.

Bell, mitjançant un acurat anàlisi quantitatiu mostrà que la previsió resultant del plantejament EPR no coincidia amb la de la Mecànica Quàntica: la discrepància apareixia tot fent variar la disposició espacial dels instruments de mesura, per exemple els angles dels imants de dispositius Stern-Gerlach per a electrons o eixos de polaritzadors per a fotons. Això es descrivia en l'anomenada **desigualtat de Bell**, que ha estat adequada a diverses suposicions experimentals posteriorment.

Quedava així oberta la possibilitat d'una confirmació experimental de les dues posicions. Com diguérem abans, Aspect ha realitzat experiències prou concloents al respecte ([Aspect, 1976]). Moltes més s'han realitzat posteriorment. En aquestes proves experimentals hom ha utilitzat sobretot fotons en lloc de partícules de espí $\frac{1}{2}$, utilitzant la polarització del fotó en lloc de l'espí. Com era d'esperar, el resultat experimental està d'acord amb la Mecànica Quàntica.

Com a conseqüència de la desigualtat de Bell i l'experimentació consegüent hom pot afirmar, amb un elevat grau de seguretat, que el plantejament de realisme local de la paradoxa EPR no és coherent i que si que hi és coherent un plantejament no local com el de la teoria dBB.

2.11 Geometrodinàmica dels sistemes microfísics

La idea que el comportament no clàssic de l'electró té a veure amb la configuració de l'espai-temps en l'àmbit microscòpic ha aparegut diverses vegades del segle XX ençà, donant lloc a les corresponents construccions teòriques.

Com és sabut, Einstein va ser el primer a utilitzar el concepte de geometrodinàmica per a caracteritzar el comportament dels cossos mitjançant la curvatura de l'espai-temps. J. Wheeler va iniciar l'extensió de la concepció geometrodinàmica als sistemes macroscòpics; pretenia substituir totes les magnituds físiques per deformacions de l'espai-temps i la va intentar estendre als microscòpics. Tanmateix, com que partia de la concepció quàntica "ortodoxa"en què no es considera la partícula ans només els aspectes ondulatoris de l'ona-partícula, no va aconseguir progressos remarcables en la construcció d'una geometrodinàmica en microfísica. Ara bé, la seua aportació potencial, en el marc de la interpretació dBB té una rellevància de primer ordre, evidenciada en l'equació Wheeler-DeWitt i perllongada en concepcions molt interessants com l 'ADM (Arnowitt, Deser, Misner).

2.12 Introducció als desenvolupaments actuals

Durant els darrers 25 anys han aparegut diverses línies de treball teòric que desenvolupen la concepció dBB. Licata i Fiscaletti n'han recollit algunes de les contribucions més significatives en el seu llibre ([Licata, 2014]). Comentarem aquelles que estan relacionades amb el present treball.

Hom pot distingir dues grans línies que de vegades convergeixen: Aquelles que cerquen compatibilitzar la teoria dBB amb la Relativitat tot introduint una foliació de l'espai-temps i aquelles que intenten una descripció de la teoria dBB en un espai-temps corbat.

En aquesta descripció introductòria, cal esmentar en primer lloc els desenvolupaments de la teoria dBB que es **basen fonamentalment en el concepte de trajectòria**, realitzats especialment per Dürr, Goldstein, Tumulka i Zanghí a partir de 1992. Sobre aquest concepte s'ha desenvolupat la denominació de "mecànica bohmiana".

D'altra part hi ha la descripció del **moviment de les partícules en espais corbats**, el que s'acosta al que nosaltres hem intentat en aquest treball. Ací cal citar a F. i A. Shojai, a partir de 2004. Aquesta aproximació parteix de la teoria de Klein-Gordon i condueix a espais-temps conformals plans. A conclusions semblants arriben Novello i Falciano, tot utilitzant la geometria de Weyl, amb connectors afins amb torsió, diferents dels utilitzats en Relativitat General. També per a ells l'espai temps corbat té una estructura conformal, condicionada, com en el cas anterior, pel potencial quàntic.

Finalment cal citar les aproximacions relatives a la **gravetat quàntica, lligades a una extensió a la teoria dBB de l'equació de Wheeler-DeWitt**. En aquesta línia començaren a treballar F. Shojai i M. Golshani en 1997, i F. i A. Shojai hi han continuat fins a l'actualitat, desenvolupant una equació de camp quàntic. En el mateix terreny ha treballat Dürr, Goldstein, Styve, De-Pinto i altres, també fins a l'actualitat.

En aquests camps es continua treballant activament, pel que podem afirmar que el tema que ens ocupa manifesta un interès considerable en la investigació teòrica.

2.12.1 Desenvolupaments dBB basats fonamentalment en la trajectòria. Foliació de l'espai temps

Els autors Dürr, Goldstein, Tumulka i Zanghí han desenvolupat, des del començament de la dècada de 1990, una interpretació de la teoria dBB on el protagonisme radica en les trajectòries. La concepció geometrodinàmica s'ha estés al domini quàntic, partint de la teoria de de Broglie-Bohm (dBB) que descriu el moviment de les partícules. Aleshores, ha estat possible lligar el concepte de potencial quàntic, característic d'aquesta teoria, amb la configuració geomètrica de l'espai-temps.

Les concepcions pròpiament geometrodinàmiques de la mecànica quàntica són recents: segons tenim notícia, la primera, per a una "ontologia"de partícules va ser la de Dürr, Goldstein, Münch-Berndl i Zahghí ([Dürr, 1999]). Aquesta aproximació es caracteritza per donar un protagonisme a les trajectòries de les partícules, les quals venen determinades per l'equació de guiatge de Bohm. Així, en realitat hi ha un cert protagonisme amagat de la funció d'ona, que determina el moviment de la partícula sense que aquesta tinga més que un paper passiu. D'altra banda, el caràcter holístic de la concepció quàntica queda poc manifest. Hom parla de "mecànica bohmiana"([Dürr, 1992]).

En aquesta concepció cal esmentar un element notable: el concepte de **fibrat de l'espai-temps en la dinàmica de la microfísica.** Un fibrat de l'espai-temps és la consideració d'aquest dividit en subespais tridimensionals, cadascun dels quals s'anomena full del fibrat. (foliació). Un full d'aquest fibrat seria l'espai tridimensional, considerat com a tangent a l'espai-temps, on tot esdeveniment és simultani. Es tracta doncs d'un element no local que reflecteix el fet objectiu de l'enllaçament de partícules. La presentació d'aquest concepte per a una "ontologia"on la part essencial la juga la partícula la va establir Dürr per a partícules (Dürr [1999]). Una exposició conceptual més extensa en va fer Tumulka (Tumulka [2006]).

En aquest sentit cal recordar que una tal foliació, quan es dona entre elements que estan enllaçats, no contradiu la localitat de la Relativitat General. Puix que les partícules enllaçades no es poden considerar elements separats en l'espai temps. Tampoc des del punt de vista d'una concepció dialèctica de la microfísica, donada l'existència d'una funció d'ona comú no factoritzable, que engloba les dites partícules.

2.12.2 Partícules en espais corbats

Un altre camí d'avanç teòric és especialment important en el nostre camp: els models de moviment de partícules en espais corbats. En aquest sentit, ja hem esmentat abans a F. i A. Shojai, no solament arran de la seua contribució a l'equació quàntica de camp, ans al moviment de partícules sense espí, tot fent equivalent llur moviment a l'experimentat en un espai-temps corbat ([Shojai and Shojai, 2004a]). El seu model deriva de l'equació de Klein-Gordon i condueix a un espai-temps que és conformalment pla, sota la influència del potencial quàntic. Shojai ha trobat mètriques conformes, en què el tensor mètric es deforma uniformement per efecte del potencial quàntic. Aportacions posteriors han desenvolupat aquestes concepcions ([Shojai and Shojai, 2011]).

D'altres desenvolupaments recents, com les de Novello et al. ([Novello et al., 2011]) arriben a conclusions semblants. Aquests autors assignen el comportament quàntic dels sistemes atòmics a l'existència d'una estructura no euclidiana en l'espai. Per fer-ho parteixen d'una geometria de Weyl, caracteritzada perquè els connectors que defineixen el desplaçament paral·lel dels vectors no són els de Levi-Civita de la Relativitat General, ans presenten també torsió, així com per un tipus especial de funcions (3D integrable). Arriben així a la conclusió que l'espai posseeix un comportament "conformeï que la curvatura d'aquest espai correspon amb el potencial quàntic. Tots els conceptes quàntics adquireixen ací un significat geomètric: el principi d'incertesa resultaria de la impossibilitat de mesurar distàncies menors que la curvatura de Weyl.

2.12.3 Equació quàntica de camp d'Einstein

Durant els darreres anys de la dècada 1960, Wheeler i DeWitt desenvolupen una equació que engloba relativitat general i quàntica, tot assignant un funcional a l'univers sencer. Aquest plantejament quàntic no podia, per motius obvis, tindre caràcter estadístic, ans s'havia de referir a un objecte únic.

L'equació Wheeler-DeWitt ha servit de base per a extensions a la formulació de de Broglie-Bohm. Durant la darrera dècada del segle XX, F. Shojai i M. Golshani varen formular una equació de camp quàntica ([Shojai and Golshani, 1998]), equivalent a l'equació de camp d'Einstein i que tendeix a aquesta en el límit clàssic. La reflexió sobre aquest tipus d'equació i les seues propietats s'ha perllongat des d'aleshores fins l'actualitat. Els treballs més rellevants al respecte són deguts a F. i A. Shojai, d'un costat ([Shojai and Shojai, 2004b]) i per Dürr, Goldstein i Struyve per altre. ([Dürr and Struyve, 2020]).

L'aproximació de F. i A. Shojai arriba a una formulació conjunta de teoria de la gravitació i mecànica quàntica. Parteixen de la formulació relativista de la mecànica quàntica de Klein- Gordon i de la concepció de Wheeler i DeWitt. Arriben a formular, des de finals del passat segle XX, formes d'una equació quàntica de camp d'Einstein. Aquesta recerca ha continuat fins avui i s'hi ha sumat Dürr, Goldstein, Struyve i altres. Aquesta recerca és enormement interessant per a l'objecte del nostre treball; tanmateix encara sembla requerir una consolidació definitiva, sobretot degut a problemes de covariança.

Com hem esmentat prèviament, a partir de la teoria dBB s'han desenvolupat concepcions com les abans esmentades apuntant a una equació de camp d'Einstein de tipus quàntic. Aquesta equació estendria l'equació relativista de camp d'Einstein al terreny quàntic, unificant la gravitació i la dinàmica quàntica.

L'equació de camp d'Einstein:

$$R^{ij} - \frac{1}{2}\,R\,g^{ij} + \Lambda\,g^{ij} = G^{ij} = \kappa\,T^{ij} \tag{2.38}$$

es transforma tot afegint un tensor corrector:

$$G^{ij} = \kappa T^{ij} - S^{ij}, \tag{2.39}$$

on S^{ij} correspon a una funció del potencial gravitacional Q_G i el potencial quàntic Q_m:

$$S^{0i} = \frac{Q_G + Q_m}{2\sqrt{-g}} g^{0i} \tag{2.40}$$

Així doncs, la part no dinàmica del tensor d'impulsió energia contravariant, identificable amb una densitat energètica, s'ajustaria al càlcul clàssic de l'equació d'Einstein, però degudament corregida pel component S^{00} de l'esmentat tensor. **En aquest fet ens basarem posteriorment per a tenir en compte la densitat energètica com a element a considerar en l'avaluació de les mètriques dels àtoms hidrogenoides segons la teoria dBB** (propietats del component energètic del tensor d'impulsió-energia), però sense entrar en els càlculs d'aquesta teoria, que excedeix els objectius del present treball.

La curvatura de l'espai-temps i el potencial quàntic estan íntimament relacionats en aquests plantejaments, com esdevé també en el nostre. Nosaltres hem triat un camí d'aproximació diferent dels d'aquelles concepcions, almenys dels que ens ha estat donat conéixer. Anteriorment hem avançat aquestes idees en ([Gómez Blanch, 2018]) i ([Gómez Blanch and Fullana Alonso, 2019]). El nostre plantejament radica en varietats lorentzianes amb connectors de Levi-Civita, perquè són els utilitzats en la Relativitat General i perquè unifiquen els conceptes de connexions afí i mètrica (transport paral·lel i distància extremal).

Capítol 3

Mecànica quàntica de de Broglie-Bohm

3.1 Introducció a la teoria de Broglie-Bohm

La teoria de la Mecànica Quàntica de de Broglie - Bohm (en endavant freqüentment abreujada com a "dBB") és objecte d'un interès creixent, en part per permetre tractar els sistemes quàntics sense perdre la noció de trajectòria i d'incorporar la dualitat ona-partícula en la seua axiomàtica. Permet així el tractament dels fenòmens individuals.

En la teoria dBB dels àtoms hidrogenoides, els electrons en estats estacionaris descriuen òrbites, guiats per l'ona pilot. És fonamental tindre sempre present que la partícula no es pot considerar separadament de l'ona pilot; ona i partícula formen una unitat indestriable. Les possibles trajectòries dels electrons, per a un nivell energètic descrit pel nombre quàntic principal n, que defineix el seu nivell energètic, són les que corresponen a una combinació lineal dels estats propis corresponents als nombres quàntics azimutal ℓ i magnètic u. De totes aquestes trajectòries, les més elementals i senzilles d'estudiar, són naturalment les d'aquests estats propis. La teoria dBB ens defineix la forma geomètrica d'aquestes trajectòries elementals, en l'espai i temps pre-relativista, euclidià. Les estudiarem per la seua major senzillesa, que tanmateix esperem que ens permeta destacar importants estructures matemàtiques i físiques.

La teoria dBB es deriva d'una manera particularment lògica partint de la forma polar de l'equació de Schrödinger. D'aquesta manera apareix una equació que és de la forma de Hamilton-Jacobi, on la fase juga el paper de funció principal de Hamilton. Apareix així, un potencial total igual al clàssic més un terme addicional anomenat potencial quàntic. Així mateix, es donen les condicions per a utilitzar coherentment el gradient de la fase com a moment covariant del moviment, el que permet derivar la trajectòria i la velocitat de la partícula.

La teoria dBB és possible estendre-la consistentment a partícules amb espí. L'extensió de la teoria dBB a la Relativitat és molt més problemàtica. La teoria de Klein-Gordon sobre una equació de Schrödinger feta covariant porta a aspectes poc consistents del corrent de probabilitat. Un tractament consistent el trobem en la teoria de Dirac, emmarcada en la Relativitat Especial, on sí que és possible la definició de trajectòries orbitals des de la perspectiva dBB. Nosaltres, però, ens limitarem a la teoria dBB sense la consideració de l'espí per tal de simplificar-la i destacar-ne els aspectes que ens interessen.

Una característica molt important de la concepció dBB és la presència d'un potencial no clàssic, el **potencial quàntic**. D'aquest potencial quàntic deriva una força quàntica que, sumada a la força d'atracció electroestàtica, dona com a resultant la força centrípeta que actua sobre l'electró, determinant la seua òrbita tancada en $\mathbb{R}^3$.

El potencial quàntic té un marcat caràcter no local. És a dir, el seu valor en un punt donat, on es troba la partícula, ve determinat pel conjunt del sistema quàntic, l'àtom en el nostre cas, de manera que una variació del sistema en un lloc diferent, es manifestaria "immediatament"en aquest, amb una aparent contradicció amb els principis de la Relativitat.

L'article d'Einstein, Podolski i Rosen sobre la completitud de la mecànica quàntica, ja citat abans, plantejava la paradoxa que es coneix amb el nom de paradoxa "Einstein-Podolski-Rosen"([Bell, 1964]). Aquest article va ser motiu perquè Schrödinger fera una comunicació a Einstein, plantejant el fenomen anomenat per ell, arran de l'article EPR, "Verschränkung"("entanglement"en anglès), és a dir **enllaçament** entre parts d'un sistema quàntic que es separen espacialment. Einstein qualificà l'enllaçament com a "Spukhafte Fernwirkung": fantasmagòrica acció a distància.

Anys més tard, J. Bell, en una notable anàlisi sobre la citada paradoxa ([Bell, 1964]), va remarcar la diferència entre el plantejament local d'Einstein i el previst per la mecànica quàntica, plantejat per Bohr. Alehores quedava oberta la possibilitat de la distinció experimental entre ambdues concepcions.

Això està lligat a l' enllaçament entre parts d'un sistema quàntic que es separen espacialment. Aquest fenomen ha estat comprovat experimentalment per Freedman i Clauser primer i posteriorment per Aspect (Aspect [1976]) i altres. Sembla clar, doncs, que el comportament de les partícules enllaçades és no local

Aleshores, si volem descriure el moviment de l'electró en l'àtom hidrogenoide mitjançant la geometria lorentziana, hem d'incorporar-hi la "no localitat", en el nostre cas de manera heurística. Tanmateix, aquesta aproximació introdueix un element que va, per així dir, precisament en direcció contrària. En efecte, en la concepció dBB el paper guia de la funció d'ona sobre la partícula, no es veu complementat per una acció de la partícula, o més exactament de la partícula i el nucli sobre la funció d'ona. Podríem citar Einstein parlant d'una situació diferent però amb certa relació:

> *"En primer lloc, és una actitud contrària al pensament científic la concepció de quelcom (el continu espai-temps) que actua per si mateix però sobre el que hom no pot exercir cap acció".*
>
> ([Einstein, 1984], Pag. 71)

En els nostres models *heurístics* la relació partícula-funció d'ona no és aquesta, ans es dona una relació **dialèctica** entre ambdues entitats. El **sentit dialèctic** de l'equació de camp d'Einstein es transfereix ací: l'espai-temps (l'ona, el tensor mètric en íntima relació amb aquella) li diu a la matèria-energia (les partícules del sistema quàntic) com s'ha de moure i la matèria-energia li diu a l'espai-temps com s'ha de corbar.

Així doncs, la nostra aproximació excedeix la concepció de de Broglie-Bohm quant que li dona un paper dialèctic a la relació entre la matèria-energia i l'ona, mentre que la concepció dBB li dona una predominança a l'ona sobre la partícula: **l'ona guia la partícula**, però la partícula no condiciona l'ona. Hi ha hagut referències a aquest possible punt de vista en la literatura (Holland [1993]). Així mateix, tal paper és remarcat en les contemporànies concepcions de l'anomenada equació quàntica de camp d'Einstein, com detallarem després.

Un element molt important de la concepció dBB és que **no li cal la presència d'un observador extern** per a configurar la teoria.

L'interés de la nostra aproximació és intentar contribuir a formar imatges aproximades explicatives de la realitat física, d'acord amb el punt de vista d'A. Messiah, qui expressava el

> *"...postulat fonamental que la natura posseeix una realitat objectiva, independent dels nostres sentits o dels nostres mitjans d'investigació, l'objecte de la teoria física és donar una explicació intel·ligible d'aquesta realitat objectiva".*
>
> ([Messiah, 1968])

Atényer una explicació coherent del món microfísic i no merament una imatge fenomenològica és un objectiu en si mateix, fins i tot si no ens acosta, almenys immediatament, a un augment de les nostres coneixences experimentals.

3.2 Presentació de la teoria dBB

En aquest capítol descriurem la teoria de de Broglie-Bohm (dBB) i la seua aplicació als àtoms hidrogenoides, que prendrem com a punt de partida posteriorment. Holland (Holland [1993]) fa un exposat notablement clar d'aquesta teoria. L'autor d'aquest treball va realitzar una primera presentació de l'aproximació a la teoria de de Broglie-Bohm en un article del 1996 ([G. and Oliva, 1996]).

La teoria dBB conté els següents principis:

- ***P1.* Partícula i ona real.**

  L'objecte quàntic elemental, la partícula, cal entendre-la com a una unitat amb una ona, anomenada "ona de matèria". La relació entre la norma del moment lineal de la partícula, p, i la longitud de l'ona λ és (relació de de Broglie):

  $$p\lambda = h \tag{3.1}$$

  Cal dir que la dualitat ona-matèria ha estat verificada en diversos experiments, especialment de difracció d'electrons sobre xarxes cristal·lines, constituint una sòlida base on es sustenta la teoria de de Broglie-Bohm així com la mecànica quàntica ondulatòria.

- ***P2.* Compliment de l'equació de Schrödinger**.

  L'ona és un camp complex que ha d'acomplir l'equació de Schrödinger:

  $$i\hbar\partial_t\Psi = \hat{H}\psi \tag{3.2}$$

  on H és l'operador hamiltonià d'un sistema clàssic equivalent, com és habitual.

  La representació més convenient de l'ona complexa en la teoria dBB és en forma polar:

  $$\Psi = Re^{i\frac{S}{\hbar}} \tag{3.3}$$

- ***P3.* Velocitat de la partícula.**

  Siga S la fase de l'ona; el moment lineal de la partícula p ve donat per:

  $$\vec{p} = \vec{\nabla} S \tag{3.4}$$

  és a dir, la velocitat de la partícula ve donada per:

  $$\vec{v} = \frac{\vec{\nabla} S}{m} \tag{3.5}$$

- ***P4.* Variables inicials. Trajectòria de la partícula.**

  Cada partícula ve definida per unes coordenades inicials x_{0i}, les quals, substituïdes en la resolució de l'equació anterior (3.5), ens proporcionen la trajectòria de la partícula. **Aquest vector inicial de posició no està comprés en la funció d'ona Ψ;** és una informació **addicional** que cal donar per a poder obtindre la trajectòria concreta d'una partícula específica.

- ***P5.* Densitat de probabilitat de localització.**

  El quadrat de l'amplitud de la funció d'ona, normalitzada de manera que la integral en tot l'espai siga la unitat, és igual a la densitat de probabilitat que la partícula **estiga** en el lloc corresponent. Designant per P aquesta densitat de probabilitat,

  $$P = R^2 \tag{3.6}$$

  La interpretació del quadrat de la funció d'ona com a densitat de probabilitat, deguda a Born, pren ací un caràcter diferent del que té en la MQ (Mecànica Quàntica) "ortodoxa", en aquesta és la densitat de *probabilitat de trobar*, mentre que en la teoria dBB és la densitat de ***probabilitat d'estar***, independentment de qualsevol observació.

  La densitat de probabilitat que una partícula estiga entre els punts $\vec{x}$ i $\vec{x} + \vec{dx}$ en l'instant t ve donada per:

  $$P = R^2(\vec{x}, t) \tag{3.7}$$

  En la teoria de de Broglie-Bohm constitueix una magnitud que té un valor inicial, funció de les coordenades, i que evoluciona al llarg del temps en condicions de conservació. Entre tots els possibles moviments que compleixen l'equació de guiatge, només aquell que té aquesta condició inicial és seleccionat. Alguns autors parlen d'"hipòtesi d'equilibri quàntic", relatiu a un sistema de partícules idèntiques amb les mateixes funcions d'ona, que adquireix una configuració d'acord amb la regla de Born.

3.3 L'equació quàntica de Hamilton-Jacobi i la de continuïtat de la densitat de probabilitat

Si substituïm (3.3) en l'equació d'ona de Schrödinger per un potencial general format per una energia potencial V i una de cinètica, expressada a partir de la velocitat que apareix a (3.4) obtenim, com hem esmentant anteriorment (2.28,2.29), aquestes dues equacions:

$$\partial_t S + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R}{R} = 0, \tag{3.8}$$

$$\partial_t R^2 + \nabla \cdot (\frac{R^2 \nabla S}{m}) = 0 \tag{3.9}$$

La primera equació té la forma de Hamilton-Jacobi. Aquest tipus d'equacions es formula per a resoldre problemes de mecànica en funció de transformacion canòniques (Goldstein [1970], pàg.323). En efecte, la dinámica d'un sistema és equivalent al desenvolupament continu d'una transformació canònica (Holland [1993], pàg. 31).

El mètode de Hamilton-Jacobi parteix de cercar una transformació canònica en l'espai de les fases del mòbil, entre la posició i moment en el moment t a les condicions inicials (o qualssevol magnituds constants). Com que cerquem transformacions canòniques, la relació entre el hamiltonià inicial H i el transformat K discreparan únicament en la derivada parcial de primer ordre d'una certa funció generatriu de la transformació F:

$$H + \partial_t F = K \tag{3.10}$$

Si fem que K siga idènticament nul·la assegurem que les variables transformades, P i Q són constants, per la definició de les derivades d'aquestes en funció del hamiltonià. Aleshores l'equació anterior esdevé:

$$H + \partial_t F = 0 \tag{3.11}$$

La funció F ha d'ésser funció de les coordenades i moments antics i nous. Hi ha diverses possibilitats de triar F segons la natura del problema (Goldstein [1970], pàg.283): en el nostre cas convé elegir-la de manera que siga funció de les coordenades inicials i dels nous moments constants. Anomenant F, com és habitual, com a S (funció principal de Hamilton), tenim:

$$\partial_t S + H(q, \partial_q S, t) = 0 \tag{3.12}$$

Identificant $\partial_q S$ amb el moment p, en particular per a $t = 0$ el moviment queda unívocament determinat. L'equació generalitzada:

$$\vec{p} = \nabla S \tag{3.13}$$

constitueix la llei bàsica del moviment. L'equació (3.8) esdevé l'expressió de **l'equació quàntica de Hamilton-Jacobi**; el primet terme ens indica l'energia total; el segon i el tercer les energies cinètica i potencial; característiques del hamiltonià clàssic i apareix un terme addicional a la forma clàssica, que en la teoria dBB hom anomena **potencial quàntic**:

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R}{R} \tag{3.14}$$

Aquest terme és imprescindible per a mantenir l'equilibri energètic del sistema quàntic. Tendeix a 0 quan els "efectes quàntics"són irrellevants i en conseqüència $\hbar$ es pot equiparar a 0. Remarquem que Q és invariant front a transformacions "conformes"d'R, és a dir, $R' = kR$, amb k real no nul. En efecte, si substituïm R per R' obtenim la mateixa equació.

La segona equació que obtenim en la substitució esmentada al principi de la secció en l'equació de Schrödinger és:

$$\partial_t(R^2) + \nabla \cdot (R^2 \frac{\vec{\nabla} S}{m}) = 0 \tag{3.15}$$

Aquesta equació té el significat de continuïtat de la magnitud R^2 si es té en compte que la velocitat de la partícula ve donada per (3.5).

Cal remarcar que R queda determinada per la condició que el seu quadrat integrat en tot l'espai tinga el valor de la unitat (normalització de R^2) i que adquireix així el significat de densitat de probabilitat.

3.4 Àtoms hidrogenoides en la teoria dBB

En aquesta secció analitzarem el cas concret de l'àtom d'hidrogen des del punt de vista de la teoria dBB. Les seues conclusions són extensibles als àtoms hidrogenoides, però ens centrarem en el cas de l'hidrogen per la seua major simplicitat puix que el nostre objectiu és destacar els aspectes físics amb una màxima facilitat explicativa.

Així doncs, en el cas de l'hidrogen en funció del principi *P2*, la funció d'ona ha de complir l'equació de Schrödinger. Per a aplicar-la, considerem un sistema **clàssic** semblant: un electró girant al voltant d'un nucli positiu, on **triem un sistema de referència en el centre de masses** (molt aproximadament el nucli). L'operador hamiltonià corresponent està composat, prescindint d'atraccions gravitatòries, per un potencial elèctric atractiu i per una energia cinètica de l'electró. Aleshores doncs, podem plantejar l'equació de Schrödinger independent del temps (estats estacionaris):

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{3.16}$$

Per tindre el potencial V simetria esfèrica, la funció Ψ ha de ser de variables separables en aquestes coordenades esfèriques.

L'equació d'ona de l'electró en un estat estacionari ha de ser solució de l'equació de Schrödinger independent del temps i les seues solucions han de ser funcions pròpies de l'operador moment cinètic al quadrat, ensems, del de la projecció del moment cinètic sobre l'eix OZ. Obtenim la següent expressió per al component en OZ de l'operador moment cinètic:

$$\hat{L}_z = -i\hbar\partial_\phi \tag{3.17}$$

i aquesta altra per al quadrat del moment cinètic:

$$\hat{L}^2 = -i\hbar^2\big[\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta\left(\sin(\theta)\partial_\theta + \frac{1}{\sin(\theta)^2}\partial^2_{\phi^2}\right)\big] \tag{3.18}$$

Ambdós operadors commuten, i llurs funcions pròpies són harmònics esfèrics, que admeten una representació de variables separables. En definitiva, la funció d'ona en l'estat estacionari es caracteritza per quatre nombres quàntics: **el nombre quàntic principal n,** que caracteritza la capa i el nivell d'energia; el **nombre quàntic secundari o azimutal** ℓ , que descriu el subnivell i té una immediata relació amb el moment cinètic de l'electró; i el **nombre quàntic magnètic, que habitualment es denota per m, però que ací anomenarem** u que descriu la projecció del moment cinètic sobre l'eix de gir. Com és sabut, u pot prendre valors enters entre $\ell = -(n-1)$ i $\ell = n-1$.

Finalment, hi ha el nombre quàntic d'espí m_s que descriu la interacció entre l'òrbita i l'espí i que no té cap paper en aquesta teoria

Assumint la simetria esfèrica del potencial elèctric $V(r)$, la funció d'ona corresponent al nivell (n, ℓ, u) es pot representar pel producte de tres funcions amb separació de variables:

$$\psi_{n\ell u}(r, \theta, \phi) = g_{n\ell u}(r) f_{\ell u}(\theta) e^{i(u\phi - \frac{Et}{\hbar})} \tag{3.19}$$

on g i f són funcions reals; E és l'energia de l'estat estacionari i, com queda dit, n, ℓ i u els nombres quàntics principal, orbital-azimutal i magnètic ($\ell \in \{0, 1, 2..n-1\}; u \in \{-l, -l+1...l-1, l\}$) i on l'exponent de e és iS:

$$e^{i(u\phi - \frac{Et}{\hbar})} = e^{\frac{i}{\hbar} S(r,\theta,\phi,t)} \tag{3.20}$$

d'on la fase S és:

$$S(r, \theta, \phi, t) = u\hbar\phi - Et \tag{3.21}$$

i la part polar de la funció d'ona hi és:

$$R(r, \theta) = g_{nlu}(r) f_{lu}(\theta) \tag{3.22}$$

Les equacions de valors propis dels dos operadors esmentats són ben conegudes:

$$\hat{L_z}\, Y_{\ell u}(\theta, \phi) = u\hbar\, Y_{\ell u}(\theta, \phi) \tag{3.23}$$

$$\hat{L^2}\, Y_{\ell u}(\theta, \phi) = \ell(\ell+1)\hbar^2\, Y_{\ell u}(\theta, \phi) \tag{3.24}$$

on $Y_{\ell u}$ són els harmònics esfèrics. L'operador quadrat del moment cinètic $\hat{L^2}$ té com a valor propi $l(l+1)\hbar$ i, doncs, el valor propi assignable al moment cinètic és:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \tag{3.25}$$

L'operador projecció de moment cinètic $\hat{L_z}$ sobre l'eix de gir tindrà el valor propi de $u\hbar$. És molt important tindre en compte que els valors propis d'aquests dos operadors, avaluats al llarg d'una trajectòria, s'han de conservar.

3.4.1 Estats estacionaris generals

En l'apartat anterior hem descrit els estats estacionaris simples. Però per a un **mateix** nivell energètic descrit pel nombre quàntic n són possibles estats estacionaris composts dels simples, amb els diversos valors del nombre quàntic azimutal ℓ i del nombre quàntic magnètic u. Ara bé: si els estats estacionaris simples són solució de l'equació de Schrödinger, també és possible matemàticament qualsevol estat combinació lineal dels anteriors. (Principi de superposició d'estats de la Mecànica Quàntica). L'expressió de l'estat estacionari més general corresponent a uns nombres quàntics concrets seria una composició lineal de les diverses funcions com la (3.19):

$$\psi(r,\theta,\phi,t) = \sum_{\ell=0}^{n-1}\sum_{u=-l}^{\ell} c_{\ell u}\psi_{n\ell u}(r,\theta,\phi,t) \tag{3.26}$$

$$= \left(\sum_{\ell=0}^{n-1}\sum_{u=-\ell}^{\ell} c_{\ell u}\, g_{n\ell u}(r)\, f_{\ell u}(\theta)\, e^{iu\phi}\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \tag{3.27}$$

on $c_{\ell u}$ són constants complexes. Elegint convenientment les constants $c_{\ell u}$ hom pot obtindre diverses formes de possibles moviments orbitals amb la mateixa energia. ([Holland, 1993], pàg.153)

El que **nosaltres estudiarem en aquest treball és la dinàmica dels estats estacionaris** simples, per tractar de caracteritzar-los en el marc espai-temporal.

3.5 Expressió de l'òrbita dBB d'un estat estacionari simple

Amb les funcions generals de R i S esmentades a l'apartat anterior podem establir la forma de l'òrbita de l'estat (n,ℓ,u), mitjançant el principi *P3*, sempre en coordenades esfèriques; m serà, d'ara endavant, la massa de l'electró, i, com queda dit, el nombre quàntic magnètic ("m"en la notació habitual) el designarem per u, per tal d'evitar confusions de lectura amb la massa. Tindrem:

$$v_r = \dot{r} = \frac{1}{m}\partial_r S = \frac{1}{m}(\partial_r(u\hbar\phi - Et)) = 0, \tag{3.28}$$

és a dir $\dot{r} = 0$. D'altra banda:

$$v_\phi = r\sin\theta\dot{\phi} = \frac{1}{mr\sin\theta}\partial_\phi S = \frac{1}{mr\sin\theta}\partial_\phi(u\hbar\phi - Et) = \frac{u\hbar}{mr\sin\theta} \quad (3.29)$$

d'on resulta:

$$\dot{\phi} = \frac{u\hbar}{mr^2\sin^2\theta} \quad (3.30)$$

i respecte a θ tindrem:

$$v_\theta = r\dot{\theta} = \frac{1}{mr}\partial_\theta S = \frac{1}{mr}\partial_\theta(u\hbar\phi - Et) = 0 \quad (3.31)$$

d'on resulta $\dot{\theta} = 0$

Integrant respecte al temps tindrem l'equació de les trajectòries:

$$\begin{aligned} r &= r_0 \\ \phi &= \phi_0 + \frac{u\hbar t}{mr^2\sin^2\theta} \\ \theta &= \theta_0 \end{aligned} \quad (3.32)$$

En la figura 3.1 mostrem l'òrbita de l'electró 2p que correspon, per a $u > 0$, a circumferències, en un pla a una certa distància de l'origen, que en un cas particular pot ser nul·la (el pla orbital conté el nucli), fase inicial i angle azimutal constants i centrades sobre l'eix z. Notem la simetria cilíndrica de les òrbites, amb u com a factor multiplicatiu sobre la velocitat lineal i angular.

Una característica molt important és que les equacions de la trajectòria són independents del nombre quàntic principal n i que sí que depenen del nombre quàntic magnètic u.

Una conseqüència immediata és que l'estructura de l'espai-temps que cerquem serà la mateixa per al mateix subnivell u de les diferents capes, sempre que $u \neq 0$.

Més endavant estudiarem les forces que intervenen sobre l'electró per a condicionar un moviment com el descrit a la figura (3.1).

3.6 Càlcul del potencial quàntic

Considerem l'equació *quàntica* de Hamilton-Jacobi (2.28). En el cas dels estats estacionaris, $\partial_t S$ és l'energia quantificada del sistema: els nivells e-nergètics són E_n. Notem que aquests nivells energètics els obtenim resolent

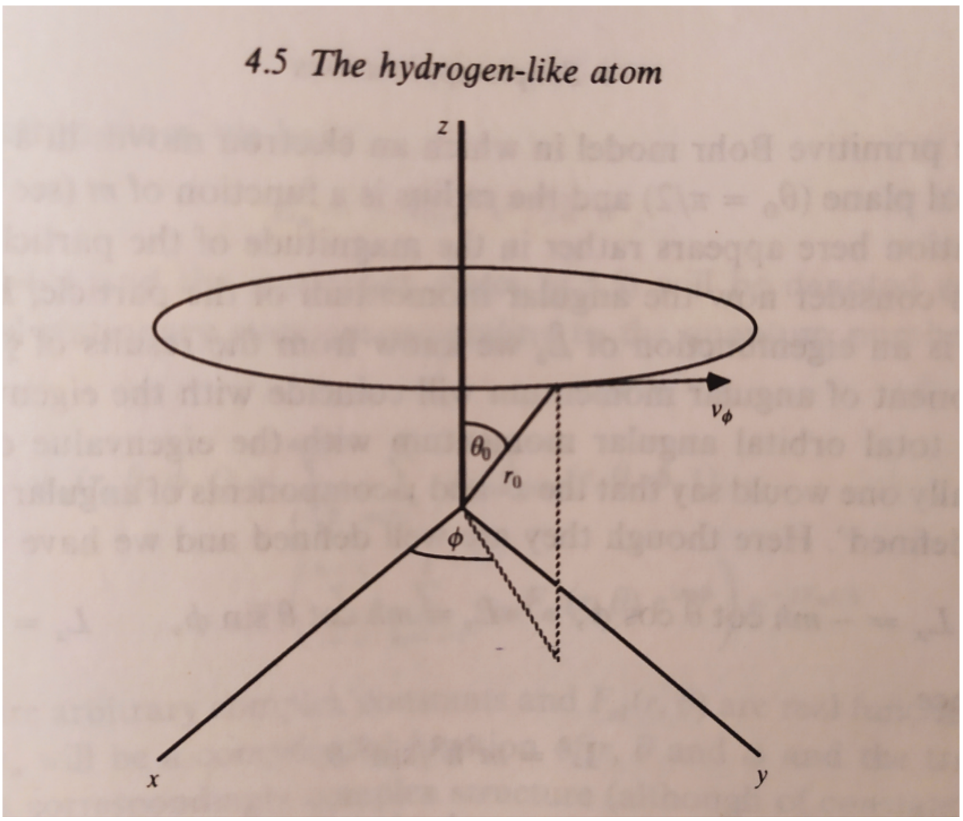

Figura 3.1: Òrbita d'un electró en un àtom hidrogenoide (Holland [1993],pàg.151)

l'equació de Schrödinger independent del temps per al sistema quàntic, en el nostre cas l'àtom d'hidrogen. Així doncs podem escriure, substituint el valor de l'energia quantificada E_n:

$$E_n = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V + Q \tag{3.33}$$

Aquesta equació se'ns presenta com a la conservació de l'energia de l'electró en l'àtom; el primer membre és l'energia del nivell energètic; el segon membre té com a primer terme l'energia cinètica i com a segon el potencial elèctric; i el tercer membre és l'energia potencial quàntica, anomenada habitualment potencial quàntic. Naturalment ací E_n té el valor quantificat habitual:

$$E_n = -\frac{mq_e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}, \tag{3.34}$$

on n és el nombre quàntic **principal**. q_e és la càrrega de l'electró i ϵ_0 és la constant dielèctrica del buit.

Notem que és possible expressar el potencial quàntic en aquest cas, sense acudir a la seua forma definitòria (2.32). Tindrem:

$$Q = E_n - \frac{(\nabla S)^2}{2m} - V \tag{3.35}$$

Aquesta manera de calcular el potencial quàntic en estats estacionaris és habitualment molt més fàcil que fer-ho a partir de la seua definició com a quocient de la laplaciana de la funció d'ona i d'aquesta mateixa.

Per a aprofundir sobre el comportament del potencial quàntic en els orbitals de l'hidrogen, posem Q en forma explicita:

$$Q = E_n - \frac{u^2\hbar^2}{2mr^2\sin^2\theta} + \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{3.36}$$

Substituint valors per als orbitals $2p$ de l'hidrogen (corresponents a $\psi_{2,1,0}, \psi_{2,1,1}, \psi_{2,1,-1}$), obtenim la representació de la figura (3.2).

En les figures (3.2) i (3.3) podem fer algunes consideracions relatives a la força quàntica. Per a valors petits de l'angle azimutal θ (per exemple les línies de color magenta i verd de la figura (3.2)) el potencial quàntic té caràcter creixent amb r, per tant, en cap moment té un extrem en què la seua derivada (la força quàntica en direcció $\vec{u_r}$) s'anul·le.

Però, per valors elevats de l'angle azimutal (a prop del pla que conté el nucli, línies roja i blava), l'equació $Q = 0$ té dues solucions reals. Entre elles, la corba passa de creixent a decreixent, atenyent un extrem màxim

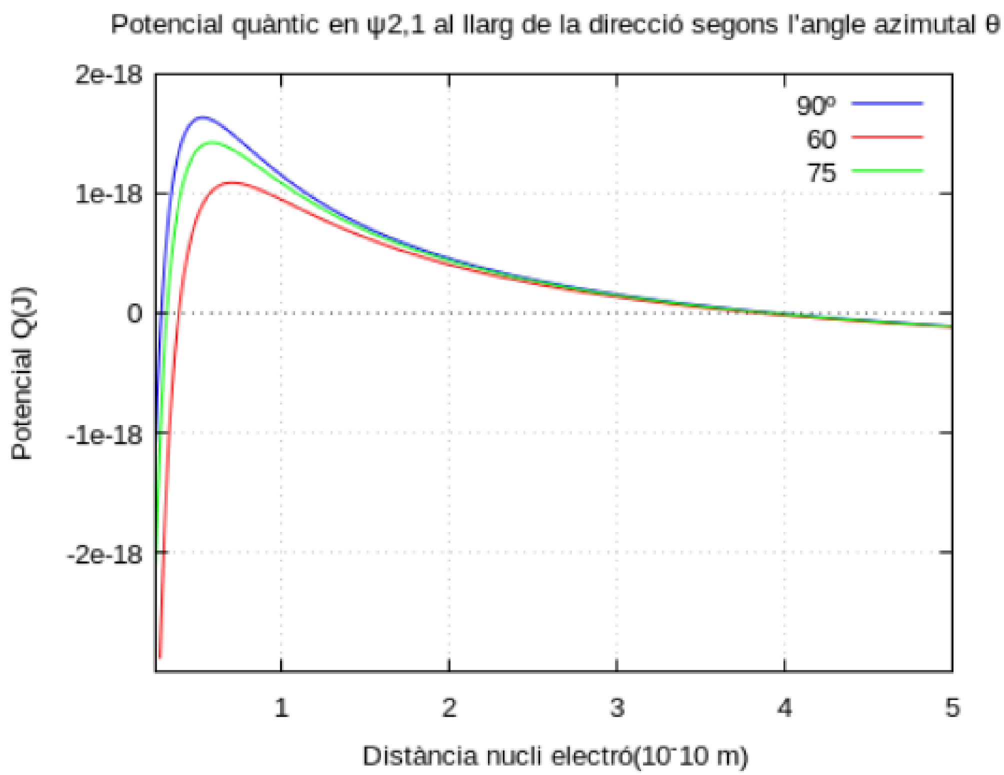

Figura 3.2: Potencial quàntic en funció de l'angle i la distància nucli-electró.

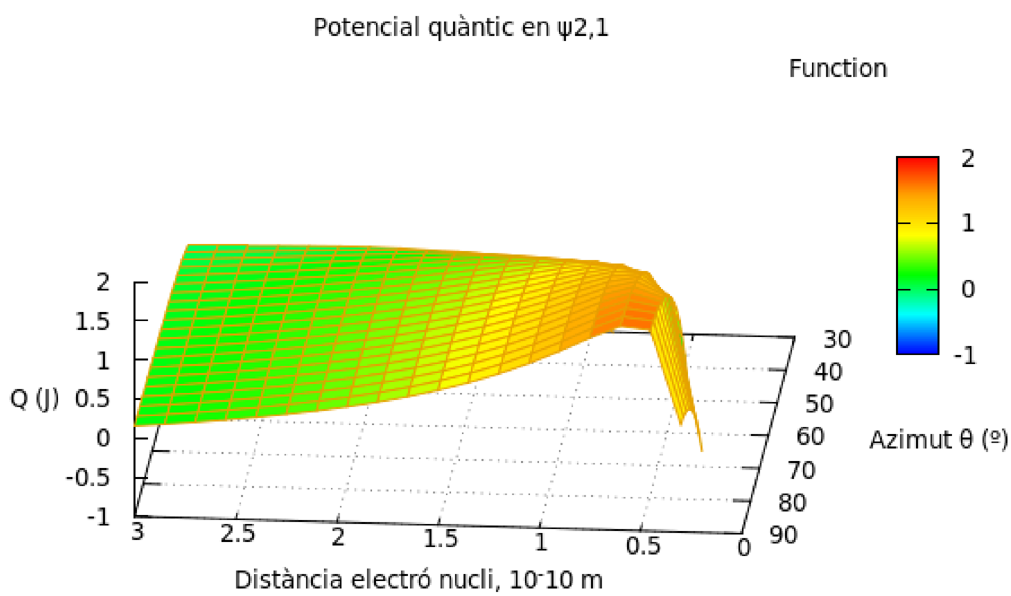

Figura 3.3: Representació tridimensional del potencial quàntic en funció de l'angle i la distància nucli-electró.

on la tangent és horitzontal i aquest component radial de la força quàntica s'anul·la.

En funció de la distància nucli-electró r, el potencial quàntic passa de negatiu a positiu en l'àmbit de 10^{-11} m.; la força quàntica només esdevé 0 quan l'electró està en el pla equatorial i el radi és el de Bohr. Només en aquesta situació el component de la força quàntica segons $\vec{u_\theta}$ esdevé també nul i l'electró es mou sota l'equilibri de la força centrípeta i l'atracció electroestàtica, com mostrarem a continuació, tot avançant el que es desenvoluparà posteriorment.

Hem observat anteriorment que el sistema que estudiem té simetria cilíndrica, pel que és convenient fer els càlculs en aquest tipus de coordenades. Així, l'expressió anterior en coordenades cilíndriques té la forma següent:

$$Q = E_n - \frac{u^2\hbar^2}{2m\rho^2} + \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0\sqrt{\rho^2+z^2}} \tag{3.37}$$

En coordenades cilíndriques, la força quàntica la podem escriure, tenint en compte que $\partial_\phi Q = 0$:

$$\vec{F}_Q = -\vec{\nabla}Q = -\partial_\rho\left(-\frac{u^2\hbar^2}{2m\rho^2} + \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0\sqrt{\rho^2+z^2}}\right)\vec{u_\rho} \tag{3.38}$$

$$-\partial_z\left(\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0\sqrt{\rho^2+z^2}}\right)\vec{u_z} \tag{3.39}$$

on el component en $\vec{u_\rho}$ s'anul·la en l'expressió coincident amb el radi de Bohr (excepte en el valor de $u = 0$) en:

$$\rho = \frac{4\pi\epsilon_0 u^2\hbar^2}{mq_e^2} \tag{3.40}$$

i el component en $\vec{u_z}$ s'anul·la per a $z = 0$, amb $\rho > 0$, com en el càlcul anterior.

Així doncs, en el cercle en el pla nodal descrit, la força quàntica s'anul·la; tanmateix, en els orbitals tipus p cal tenir en compte que el pla perpendicular a l'eix és un pla nodal, de probabilitat nul·la de presència de l'electró. És a dir, la "imatge"del model de Bohr d'un electró orbitant el nucli en el pla nodal és totalment improbable en els orbitals tipus p. En veurem una deducció més detallada a l'apartat següent.

3.7 Força quàntica

La força quàntica $\vec{F}_Q$, atribuïble al potencial quàntic (en realitat energia quàntica) Q, l'obtenim a partir de l'equació anterior (3.37) prenent el gradient canviat de signe de Q:

L'operador gradient ∇ en esfèriques serà llavors:

$$\vec{\nabla} = \partial_r \vec{u}_r + r^{-1} \partial_\theta \vec{u_\theta} + r^{-1} \operatorname{cosec} \theta \, \partial_\phi \vec{u}_\phi \tag{3.41}$$

Aplicant aquest operador a Q, resulta:

$$\vec{F}_Q = -\vec{\nabla} Q = \left(-\frac{u^2 \hbar^2}{m r^3 \sin^2 \theta} + \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right) \vec{u}_r - \left(\frac{u^2 \hbar^2 \cos\theta}{m r^3 \sin^3 \theta} \right) \vec{u}_\theta, \tag{3.42}$$

equació que mostra la força $\vec{F}_Q$, que sumada a la força elèctrica electró-nucli té com a resultat la força inercial centrípeta, dirigida cap a l'eix de gir. En efecte, la força elèctrica derivada del potencial és:

$$\vec{F}_E = -\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{u}_r, \tag{3.43}$$

que és igual en mòdul i de direcció oposada al segon terme del segon membre de (3.42) i que el denominarem $\vec{F}_{QE}$:

$$\vec{F}_{QE} = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{u}_r \tag{3.44}$$

Mentre que els altres dos termes, que anomenarem força mecànica quàntica $\vec{F}_{QM}$:

$$\vec{F}_{QM} = -\frac{u^2 \hbar^2}{m r^3 \sin^2 \theta} \vec{u}_r - \frac{u^2 \hbar^2 \cos\theta}{m r^3 \sin^3 \theta} \vec{u}_\theta = -\frac{u^2 \hbar^2}{m r^3 \sin^3 \theta} \left(\sin\theta \vec{u}_r + \cos\theta \vec{u}_\theta \right), \tag{3.45}$$

que la podem representar en coordenades cilíndriques i resulta:

$$\vec{F}_{QM} = -\frac{u^2 \hbar^2}{m \rho^3} \vec{u}_\rho \tag{3.46}$$

La interpretació d'aquesta força $\vec{F}_{QM}$ com a la força centrípeta de l'electró és immediata. En efecte, si representem la velocitat angular de l'electró en polars, com férem en (3.30):

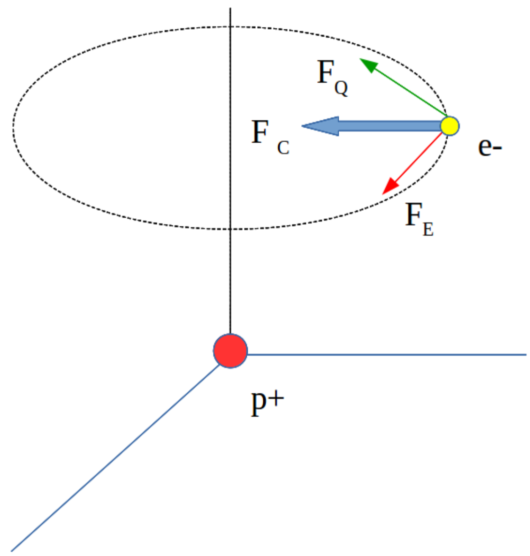

Figura 3.4: Forces actuants sobre l'electró en el pla de fase constant que passa per l'eix de gir.

$$\dot{\phi} = \frac{u\hbar}{m\rho^2} \tag{3.47}$$

Obtenim la força centrípeta, $\vec{F}_C$:

$$\vec{F}_C = -m\dot{\phi}^2\rho\vec{u}_\rho = -m\left(\frac{u\hbar}{m\rho^2}\right)^2\rho\vec{u}_\rho = -\frac{u^2\hbar^2}{m\rho^3}\vec{u}_\rho, \tag{3.48}$$

és a dir:

$$\vec{F}_{QM} = \vec{F}_C \tag{3.49}$$

quedant així mostrat com la força quàntica sumada a l'atracció elèctrica de l'electró pel nucli té com a resultant la força centrípeta de l'electró. La suma $\vec{F}_E + \vec{Q}_E$ produeix un moviment circular uniforme de l'electró.

L'expressió de la força quàntica (3.42) és coherent amb l'expressió del radi de Bohr de l'àtom de l'hidrogen. En efecte, fent $\theta = \pi/2$, com correspon a una òrbita en el pla que conté el nucli, l'equació (3.42) esdevé:

$$\vec{F}_Q(\theta = \frac{\pi}{2}) = \left(\frac{u^2\hbar^2}{mr^3} - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right) \vec{u_r} \tag{3.50}$$

I la força quàntica s'anul·la tot igualant la força centrípeta i l'elèctrica (si $r \neq 0$)per als valors:

$$\left(\frac{u^2\hbar^2}{mr^3} - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right) = 0, \tag{3.51}$$

que correspon al radi de Bohr, **si incrementàrem u una unitat**:

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 u^2\hbar^2}{mq_e^2} \tag{3.52}$$

És a dir: la teoria dBB per als àtoms hidrogenoides és coherent amb la hipòtesi del model de Bohr, però amb notables diferències:

- Per al nombre quàntic magnètic $u = 0$, corresponent a l'orbital s, no hi ha moviment: **l'electró romà estàtic envers el nucli. La velocitat és 0, com és immediat comprovar**.

- El pla de gir de l'electró no ha de contindre, necessàriament, el nucli.

- En el cas de l'orbital $2p$ l'òrbita de Bohr correspon a zones de probabilitat nul·la (pla nodal).

Pel que fa a la dependència de la força quàntica amb l'angle azimutal, en l'equació (3.42) veiem que, per a r constant, el component radial varia proporcionalment a $-\sin^2\theta$, mentre que el component dirigit a l'eix de gir varia amb $-\sin^3\theta$. En créixer θ disminueix r (distància electró-eix de gir) i per tant augmenta la velocitat de la partícula, a causa de la constància del seu moment cinètic L_z. Per tant, també augmenta la força centrípeta.

És interessant remarcar la relació entre els valors absoluts del component radial (equivalent a la força centrípeta) i el de la direcció vers el nucli (equivalent a la força dirigida cap al nucli). Aquesta relació va des de la igualtat per a radis de Bohr quan el pla orbital inclou el nucli, com hem mostrat abans, i tendint a 0 quan el radi de gir tendeix a 0, acostant-se a l'eix de gir, és a dir θ proper a 0. La relació podríem establir-la així:

$$\kappa(\theta) = \frac{|F_{QM}|}{|F_{QE}|} = \frac{u^2\hbar^2}{mr^3 sin^3\theta} : \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{1}{sin^3\theta}\frac{4\pi\epsilon_0 u^2\hbar^2}{q_e^2 mr} \tag{3.53}$$

Si $r = r_{Bohr}$,

$$\kappa(\theta) = \frac{1}{sin^3\theta} \tag{3.54}$$

Per a donar-ne una imatge numèrica, per a un angle $\theta = \frac{\pi}{4}$, la relació entre el mòdul de la força centrípeta i la força elèctrica és de l'ordre de 2,86 , situació que s'ha representat, de manera il·lustrativa, a la figura (3.4).

Notem finalment que, **per a valors de l'angle azimutal diferents de $\theta = \frac{\pi}{2}$, la força quàntica condiciona el moviment de l'electró en un pla orbital a una certa distància del nucli.**

3.8 Càlcul del potencial quàntic a partir de la funció d'ona

En una secció anterior hem calculat el potencial quàntic a partir de l'equació quàntica de Hamilton-Jacobi. Tanmateix, el càlcul directe a partir de la seua definició és útil quan hom coneix la funció d'ona, sense haver de plantejar dita equació. Volem ara realitzar l'aplicació directa de l'equació definitòria per a un orbital determinat i verificar que condueix al mateix resultat.

Siga per exemple un electró en l'estat ($n = 2$, $\ell = u = 1$); la seua funció d'ona en esfèriques ve donada per:

$$\psi_{2,1,1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}a_0^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\sin\theta e^{\pm i\phi} \tag{3.55}$$

on a_0 és l'anomenat radi de Bohr, definit per:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{mq^2}, \tag{3.56}$$

i R, la part de l'amplitud polar de Ψ, és:

$$R = \frac{1}{8\sqrt{\pi}a_0^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\sin\theta \tag{3.57}$$

El potencial quàntic ve definit per:

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R}{R} \tag{3.58}$$

Per aquest càlcul podem prescindir en R de la constant multiplicativa, $\frac{1}{8\sqrt{\pi}a_0^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{a_0}$, tenint en compte que tota constant multiplicativa desapareix en el càlcul de Q.

Així, doncs, operarem amb:

$$R' = r\, e^{-\frac{r}{2a_0}} sin\theta \tag{3.59}$$

La laplaciana en esfèriques ve donada per l'expressió següent:

$$\nabla^2 R' = \frac{1}{r^2}\partial_r\left(r^2\,\partial_r R'\right) + \frac{1}{r^2\,\sin\theta}\partial_\theta\left(\sin\theta\,\partial_\theta R'\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\partial_{\phi^2}R' \tag{3.60}$$

Calculem les derivades parcials de R':

$$\partial_r R' = (1 - \frac{r}{2a_0})\, e^{-\frac{r}{2a_0}}\, \sin\theta \tag{3.61}$$

$$\partial_\theta R' = r\, e^{-\frac{r}{2a_0}}\, \cos\theta, \tag{3.62}$$

i continuant l'operació obtenim:

$$\frac{\nabla^2 R'}{R'} = \frac{(r^2 - 8a_0 r + 4a_0^2)\,\sin^2\theta + 4a_0^2\cos^2\theta}{4a_0^2 r^2\sin^2\theta} \tag{3.63}$$

D'on podem escriure Q:

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R'}{R'} = -\frac{\hbar^2}{8ma_0^2} + \frac{\hbar^2}{ma_0 r} - \frac{\hbar^2}{2mr^2\sin^2\theta} \tag{3.64}$$

Substituïm ara el radi de Bohr a_0 (3.56):

$$Q = -\frac{mq^4}{32\epsilon_0^2\hbar^2} + \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\hbar^2}{2mr^2\sin^2\theta} \tag{3.65}$$

equació idèntica a (3.36): en el segon membre, el primer terme correspon al nivell energètic de l'electró per a $n = 2$; el segon terme, al potencial elèctric i el tercer a l'energia cinètica.

3.9 Potencial efectiu total i les seues simetries

.

D'acord a allò dit en els punts anteriors podem concloure que:

- La partícula està sotmesa a dos potencials: el potencial elèctric i el potencial quàntic.
- Les forces corresponents als potencials anteriors tenen una resultant que és de tipus centrípeta, estant orientada cap a l'eix de gir.
- Tant el potencial elèctric com el potencial quàntic depenen de z, però el potencial total és independent de z.

Segons (3.46), la força efectiva actuant sobre l'electró té un sol component en direcció radial, cap a l'eix de gir; procedint a la seua integració obtenim el potencial efectiu total:

$$\Phi^{u_\rho} = -\frac{1}{m}\int \vec{F}_{QM} d(\rho\vec{u_\rho}) = \frac{f^2c^2}{m\rho^2} + K \tag{3.66}$$

(K constant).

Resulta així que tenim una simetria notable en el potencial efectiu total. En conseqüència, els components de la **mètrica** han d'ésser independent de la direcció temporal i del vector corresponent a l'eix de gir.

Els **tres** vectors de Killing que s'evidencien són:

$$\xi = \partial_t \tag{3.67}$$
$$\eta = \partial_\phi \tag{3.68}$$
$$\nu = \partial_z \tag{3.69}$$

Notem addicionalment que, segons allò que hem dit a l'apartat anterior, els radis de Bohr són inclosos dins dels prevists per la teoria, però no són pas els únics. De fet, la probabilitat de trobar la partícula a un radi determinat té una variació lenta, no concentrada abruptament sobre determinats valors. En realitat, una ampla gamma de radis són previsibles, amb probabilitat diversa.

Cal remarcar-hi que, per a un nivell quàntic magnètic determinat, u, són possibles tota una congruència de radis diferents; totes les possibles òrbites electròniques han de tenir el mateix moment cinètic L_z. En conseqüència, radis majors comporten velocitats de la partícula menors, per tal de conservar el moment cinètic corresponent. Aquestes velocitats menors comporten moments lineals menors i longitud d'ona de de Broglie majors.

Capítol 4

La hipòtesi geodèsica dels estats estacionaris de l'àtom hidrogenoide en la teoria de de Broglie-Bohm

Com s'ha descrit al capítol anterior, en la teoria de de Broglie-Bohm (dBB), els estats estacionaris dels àtoms hidrogenoides impliquen trajectòries circulars de l'electró. Si aquests tipus de trajectòries són descrites per electrons lliures, segueixen les lleis de l'electromagnetisme. Però l'esmentat model d'àtom hidrogenoide és inconsistent amb l'electromagnetisme perquè, com és sabut, una càrrega elèctrica giratòria emetria energia i cauria sobre el nucli. El que òbviament no esdevé. *L'electró atòmic sembla no seguir les mateixes lleis de la Física que observa l'electró lliure que es mou accelerat.*

La hipòtesi que nosaltres fem, i que es desenvolupa *heurísticament* en aquest treball per a explorar les seues implicacions, n'és la següent: **el sistema quàntic electró-nucli crea una deformació en l'espai-temps i l'electró (partícula i ona acompanyant) circulen per una geodèsica d'aquest, de manera que ja no li són aplicables les lleis de circulacions de càrregues en l'espai pla**.

Com a conseqüència d'aquesta hipòtesi, haurem de **substituir l'espai clàssic i temps absolut de la teoria dBB per una geometria no euclidiana. Nosaltres hem escollit, per raons de semblança amb la Relativitat General, l'espai-temps d'una varietat lorentziana. Interpretarem, doncs, la dinàmica de la teoria dBB en el marc d'una geometria lorentziana.**

En un treball recent, l'autor va realitzar una primera aproximació al tractament relativista de les trajectòries geodèsiques ([Haranas, 2016]).

4.1 Mètriques euclidianes, tangent i osculatriu. Correspondència de primer i segon ordre

Volem establir la relació entre una varietat lorentziana i el seu espai tangent minkowskià per justificar en rigor les relacions geomètriques entre ambdós a nivell diferencial.

La teoria de de Broglie-Bohm que estem considerant està formulada en un espai i temps pre-relativista, "clàssic". En la representació cilíndrica equival a substituir la descripció d'un esdeveniment per (ρ, ϕ, z, t) per $(x^1 = \rho, x^2 = \phi, x^3 = z, x^4 = ct)$, simplement un canvi de notació i d'escala temporal. Aleshores establim una correspondència biunivoca amb un espai-temps de Minkowski amb les mateixes coordenades. Aquest espai temps de Minkowski és una varietat Lorentziana particularment senzilla, puix que la seua curvatura és nul·la. Una varietat Lorentziana qualsevol té com a tangent en un punt un espai-temps de Minkowski; el que ens permet identificar un desplaçament *diferencial* de la trajectòria de l'electró amb un desplaçament en la varietat.

La justificació matemàtica d'aquesta relació local es veu descrita de manera rigorosa mitjançant els conceptes de *mètrica tangent a una varietat i correspondència de primer ordre* ([Lichnerowicz, 1968], p. 122)

Els conceptes de mètrica tangent i correspondència de primer ordre són aplicables a varietats riemannianes generals (incloent-hi les pseudo riemannianes o lorentzianes) i els espais euclidians generals (incloent-hi els pseudo euclidians). Ens limitarem ací al nostre cas concret de varietats lorentzianes i espais de Minkowski

Considerem una varietat lorentziana V_n de coordenades y^i, i l'espai minkowskià $\mathcal{E}_n$, amb la mateixa dimensió i la mateixa signatura. Suposarem en allò que segueix que la varietat admet la mètrica:

$$ds^2 = g_{ij}(y^i)dy^i dy^j, \tag{4.1}$$

amb els habituals requisits de diferenciabilitat de les $g_{ij}(y^i)$ fins un ordre elevat. Siga un punt M_0 de la varietat, de coordenades (y_0^i). A aquest li farem correspondre un punt imatge m_0 de l'espai minkowskià amb un sistema de referència $(m_0, \vec{e_i})$ i la restricció que:

$$\vec{e_i}\vec{e_j} = (g_{ij})_0, \tag{4.2}$$

de manera que els coeficients $(g_{ij})_0$ siguen els mateixos que els que defineixen localment la forma quadràtica fonamental de la varietat, al punt M_0 .

Aleshores fem correspondre a un punt M de la varietat, de l'entorn de M_0 de coordenades (y^i), el punt m de l'espai minkowskià descrit pel vector $m_0\vec{m}$ donat per:

$$m_0\vec{m} = \left[(y^i - y_0^i) + \Lambda^i_{(2)}(y^k - y_0^k)\right]\vec{e_i}, \tag{4.3}$$

on les funcions $\Lambda^i_{(2)}$ han d'ésser de segon grau respecte a $y^k - y_0^k$, per a valors propers a 0 d'aquestes variables. D'aquesta manera, hem establit una representació de primer ordre, on m_0 és la imatge de M_0 i m és la imatge de M.

Mitjançant l'equació definitòria de la correspondència (4.3), el punt m de l'espai minkowskià queda definit per les (y^i), les quals constitueixen un sistema de coordenades per a m, naturalment en l'entorn de m_0. D'aquesta mateixa expressió deduïm els vectors unitaris d'aquest sistema de referència:

$$\left(\frac{\partial\vec{m}}{\partial y^i}\right)_0 = \vec{e_i} \tag{4.4}$$

Aleshores, designant l'element de línia de l'espai minkowskià per:

$$\overline{ds}^2 = \overline{g}_{ij}dy^i dy^j, \tag{4.5}$$

els valors del tensor mètric de les dues mètriques coincideix per a $y^i = y_0^i$:

$$(\overline{g}_{ij})_0 = \vec{e_i}\vec{e_j} = dy^i dy^j = (g_{ij})_0 \tag{4.6}$$

Les dues mètriques s'anomenen tangents en el punt $y^i = y_0^i$, on coincideixen. Aquesta correspondència és un homomorfisme.

És immediat evidenciar que un canvi de coordenades en la varietat conduiria a resultats equivalents en l'espai; el concepte de representació de primer ordre és independent del sistema de coordenades utilitzat. En particular, el valor de l'element diferencial de línia romandrà constant en qualsevol canvi de coordenades.

Establint una transformació de coordenades convenient, podem passar de la mètrica de la varietat i de l'espai minkowskià definit, a un espai de Minkowski de mètrica ortogonal η_{ij}, en què coneixem l'evolució de l'electró segons la teoria dBB. La distància elemental entre els punts de la varietat M_0 i M serà igual a la dels dos punts imatge de l'espai minkowskià m_0 i m:

$$\overline{M_0M}^2 = \overline{m_0m}^2 = (g_{ij})_0 dx^i dx^j \tag{4.7}$$

En particular, seran iguals la distància entre dos punts de la geodèsica propers diferencialment, descrites per un costat en funció de les consideracions anteriors i per l'altre en funció de l'equació de la geodèsica.

Notem que, si haguéssem de comparar tensors en punts propers de la varietat, la consideració de mètrica tangent no seria suficient i hauríem de recórrer a **una aproximació de segon grau i a una mètrica osculatriu.** Aquesta es defineix de la manera següent:una representació de primer ordre es diu que és de segon ordre si l'equació (4.3) es substitueix per:

$$m_0\vec{m} = \left[(y^i - y_0^i) + \frac{1}{2}(\Gamma^i_{jk})_0 (y^j - y_0^j)(y^k - y_0^k) + \Psi^i_{(3)}(y^k - y_0^k) \right] \vec{e_i}, \tag{4.8}$$

on $(\Gamma^i_{jk})_0$ són els connectors afins al punt M_0.

Es demostra ([Lichnerowicz, 1968], pàg.130) que la mètrica riemanniana i l'euclidiana (lorentziana i minkowskiana al nostre cas) tenen els mateixos coeficients i derivades al punt $y^i = y_0^i$, el que legitima moltes aplicacions geomètriques sobre les varietats.

Hem justificat així les relacions entre els espais euclidians i les varietats riemmanianes generals, incloent naturalment els espai-temps minkowskians i les varietats lorentzianes. **Aquestes són les bases per a una transferència de propietats geomètriques característiques dels espais euclidians a les varietats, la descripció dels espais tangents i les relacions entre els tensors en l'àmbit local.**

4.2 Cap a una mètrica de l'espai temps en els estats estacionaris dels àtoms hidrogenoides

Els estats estacionaris són un cas particularment adequat per a estudiar les forces actuants en la natura, puix que partim de la certesa de l'equilibri d'aquestes forces durant el període de temps sota estudi.

L'estudi dels estats estacionaris dels àtoms hidrogenoides mitjançant la teoria de de Broglie-Bohm presenta la facilitat especial de poder calcular la trajectòria de l'electró i, d'acord amb les nostres hipòtesis, considerar-la com a la geodèsica d'un espai-temps lorentzià.

Se'ns planteja així un context de treball oposat a aquell que és habitual en Relativitat General, on es tracta de partir d'una configuració energètica del sistema en estudi, per a derivar-ne el corresponent tensor d'impulsió-energia. A partir d'aquest hom cerca una mètrica de l'espai-temps. I partint *d'aquesta mètrica, hom cerca les geodèsiques corresponents, concretant finalment aquella o aquelles que compleixen certes condicions addicionals. En el nostre cas, per contra, partim de la hipòtesi que certes corbes espai-temporals, derivades de la teoria de de Broglie-Bohm, es consideren geodèsiques; i es tracta de trobar la corresponent mètrica, amb certes condicions addicionals, les fonamentals de les quals són que es respecten les lleis de conservació quàntiques (en particular la conservació del moment cinètic).*

Per contra, en el marc teòric dBB i en el propòsit d'aquest estudi, no podem establir com a condició que els sistemes quàntics complesquen l'equació de camp d'Einstein, encara que es pot prendre com a referència aproximativa la compatibilitat del contingut energètic del sistema amb el corresponent component del tensor d'impulsió-energia.

4.3 Condicions per a les mètriques compatibles amb les geodèsiques dBB

4.3.1 Punts de partença des de la teoria de de Broglie-Bohm dels estats estacionaris dels àtoms hidrogenoides

Considerem un àtom d'hidrogen en el marc de la teoria de de Broglie-Bohm. Les òrbites descrites pels electrons corresponen a estats estacionaris; doncs, d'acord amb el nostre plantejament geometrodinàmic **podem establir la hipòtesi que l'electró en l'àtom descriu una geodèsica d'un espai-temps lorentzià amb energia total constant i amb acceleració (covariant) nul·la.**

Com que les trajectòries de l'electró en un àtom d'hidrogen són calculables en la teoria de de Broglie-Bohm -coherentment no relativista, tenint en compte que la velocitat de l'electró assignada a l'àtom d'hidrogen és petita comparada amb la de la llum- i que l'estat del potencial al sistema atòmic és conegut; podem pensar en **identificar el seu moviment, a nivell diferencial, amb el d'una partícula en una varietat lorentziana i derivar d'aquesta identificació un tensor mètric,** caracteritzant així la geometria de l'espai-temps lorentzià en l'entorn de les partícules.

Reprenent allò que hem dit al capítol 3, suposem un sistema de coordenades esfèriques amb origen al centre de masses de l'àtom d'hidrogen, molt a prop del nucli. La funció d'ones del sistema conjunt la suposem factoritzable entre la funció del nucli i la de l'electró; a més, aproximem la massa equivalent de l'electró a la massa d'aquest, prescindint de correccions. En definitiva, simplifiquem l'àtom d'hidrogen com a un sistema físic d'un electró i un protó units per un camp de forces electroestàtic i, com veurem, per un camp derivat del potencial quàntic.

D'acord amb la interpretació de de Broglie-Bohm exposada al capítol 3, les velocitats, sempre en coordenades **esfèriques** (m massa de l'electró), venen donades per:

$$v_r = \dot{r} = \frac{1}{m}\partial_r S = 0 \tag{4.9}$$

$$v_\phi = r\sin\theta\dot{\phi} = \frac{1}{mr\sin\theta}\partial_\phi S = \frac{u\hbar}{mr\sin\theta} \tag{4.10}$$

$$v_\theta = r\dot{\theta} = \frac{1}{mr}\partial_\theta S = \frac{1}{mr}\partial_\theta(n\hbar\phi - Et) = 0 \tag{4.11}$$

Integrant respecte al temps tenim l'equació de les trajectòries:

$$\begin{aligned} r &= r_0 \\ \phi &= \phi_0 + \frac{u\hbar t}{mr^2\sin^2\theta} \\ \theta &= \theta_0 \end{aligned} \tag{4.12}$$

que, com s'indicà al capítol 3, corresponen, per a $u \neq 0$, a circumferències a distància de l'origen, fase inicial i angle azimutal constants centrades sobre l'eix azimutal. Notem la simetria cilíndrica de les òrbites, amb el nombre quàntic magnètic u com a factor multiplicatiu sobre la velocitat lineal i angular.

Això és degut, en el marc d'una representació newtoniana, a la coexistència de dos potencials, que impliquen dues forces, una de tipus central (electroestàtica) i una altra, deguda al potencial quàntic. La resultant d'aquestes dues forces serà una força centrípeta que establirà la trajectòria circular de l'electró.

La simetria del problema ens condueix a utilitzar **coordenades cilíndriques** per a simplificar-lo al màxim, en particular per a conduir a expressions separables. En coordenades cilíndriques lligades al centre de masses (pràcticament al nucli) (ρ, ϕ, z), les equacions horàries de la trajectòria d'un electró en el model de de Broglie-Bohm seran doncs (amb $\phi_0 = 0$):

$$
\begin{aligned}
x^1 &= \rho \\
x^2 &= \phi = \frac{u\hbar t}{m\rho^2} \\
x^3 &= z
\end{aligned}
\tag{4.13}
$$

Els valors de ρ i de z seran fixes per a cada òrbita electrònica.

El valor del radi de gir el simbolitzarem per ρ_0; la variable ρ la utilitzarem per a designar altres punts de l'espai, especialment en relació al voltant de ρ_0.

El valor de z pot ésser, en principi qualsevol, així com el de ρ_0; però en aquest cas el valor de la velocitat quedarà condicionat al fet que el **moment cinètic** ha de romandre constant en qualsevol de les òrbites considerades. Els valors més freqüentment trobats de ρ i z venen condicionats per consideracions probabilístiques, d'acord al principi *P5* conduint a la coneguda distribució dels orbitals atòmics. En la figura (4.1) hem representat l'orbital 2p de l'hidrogen: les trajectòries seguides pels electrons serien circumferències concèntriques a l'eix z, contingudes en plans normals a aquest.

Cal remarcar que el nostre model exclou els radis de gir extremadament petits, en les quals la velocitat de l'electró ateny valors molt elevats.

4.3.2 De l'espai euclidià de l'observador a la varietat Lorentziana de l'electró

En el marc de la teoria dBB, considerem el moviment de l'electró al voltant del protó en un espai euclidià i temps absolut; representem-lo mitjançant un espai-temps minkowskià amb **equacions horàries:**

$$
\begin{aligned}
x^1 &= \rho_0 \\
x^2 &= \phi = \frac{u\hbar t}{m\rho_0^2} \\
x^3 &= z \\
x^4 &= ct
\end{aligned}
\tag{4.14}
$$

i **quadrivelocitat**:

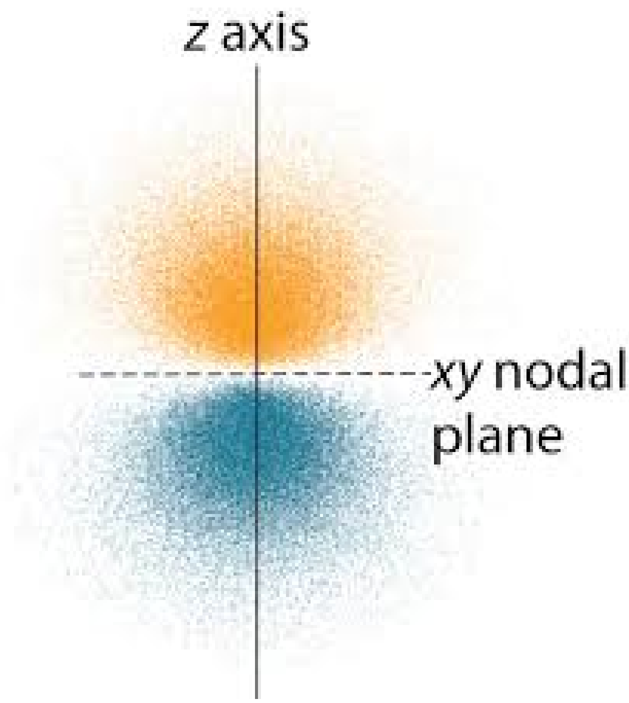

Figura 4.1: Representació dels orbitals $2p$ de l'Hidrogen.

$$
\begin{aligned}
u^1 &= 0 \\
u^2 &= \omega = \frac{u\hbar}{m\rho_0^2} \\
u^3 &= 0 \\
u^4 &= c
\end{aligned}
\tag{4.15}
$$

on u^2 és la velocitat angular constant. Utilitzarem la notació $u^2 = \omega$ per tal d'evitar confusions amb el nombre quàntic magnètic. Així mateix, introduïm dues constants per tal de simplificar la notació: b i f. La constant b:

$$b = \frac{u\hbar}{m} \tag{4.16}$$

b té el significat físic d'un moment cinètic per unitat de massa i depèn del nombre quàntic magnètic u. En el cas concret de l'orbital $2p$, $b = 1,158.10^{-4}m^2.seg^{-1}$

Segons conveniència, utilitzarem en lloc de b, la constant f, independent del nombre quàntic u, però incloent-hi la velocitat de la llum:

$$f = \frac{\hbar}{mc} \tag{4.17}$$

La dimensió de f és de longitud, perquè $\hbar$ té les dimensions d'una acció. Coincideix amb l'anomenada ***longitud reduïda de Compton***. Aquesta longitud és un paràmetre característic de l'electró lliure, que apareix en diverses equacions quàntiques, com ara l'equació relativista de Klein-Gordon i l'equació de Dirac. També l'equació de Schrödinger es pot reformular utilitzant aquesta constant. Donada la seua importància, la longitud reduïda de Compton s'ha calculat amb gran precisió, admetent-se el valor següent (CODATA):

$$f = 3{,}8615926796(12)\,.10^{-13}\ \mathrm{m}$$

La constant f és independent del nombre quàntic magnètic i permet expressions on la dependència d'aquell es fa manifesta. La relació entre les dues constants definides és:

b=ufc

4.4 Compatibilitat de les geodèsiques dBB i la mètrica de la varietat

D'acord amb les nostres hipòtesis, el moviment circular de l'electró descrit per la teoria dBB de l'àtom hidrogenoide constitueix una geodèsica d'un cert espai-temps, caracteritzat per una mètrica lorentziana.

El fet de disposar de les equacions de la trajectòria o, més exactament, de les equacions horàries del moviment de l'electró (4.14) ens possibilita substituir directament en l'equació de les geodèsiques de la varietat, en una mètrica a determinar.

Aleshores, les geodèsiques de l'espai-temps representat per la varietat vindran donades prenent com a paràmetre el temps propi que, tenint en compte que la seua velocitat és de l'ordre de $10^{-2}c$, assimilem al temps de l'observador inercial (índexs llatins variant entre 1 i 4):

$$\frac{d^2x^j}{dt^2} + \Gamma^j_{ik}\frac{dx^i}{dt}\frac{dx^k}{dt} = 0 \tag{4.18}$$

L'equació anterior té el significat físic d'imposar a la partícula una acceleració nul·la, calculada com a derivada covariant de la quadrivelocitat. El quadrivector velocitat experimenta un *transport paral·lel* al llarg de la trajectòria.

La "força"en la direcció "x^j"depèn de les velocitats en cadascuna de les direccions i i k. Els valors Γ^j_{ik} adquireixen així la funció d'uns coeficients d'acció de la influència de les combinacions de velocitats de les altres direccions sobre l'acceleració i, doncs, sobre la força.

La quadrivelocitat l'hem avaluada anteriorment a (4.14), pel que podem escriure (notem que prenem com a variable de derivació t i no $x^4 = ct$):

$$\begin{aligned}
\frac{dx^1}{dt} &= \dot{\rho} = u^1 = 0 \\
\frac{dx^2}{dt} &= \dot{\phi} = \omega = u^2 = \frac{u\hbar}{m\rho_0^2} \\
\frac{dx^3}{dt} &= \dot{z} = u^3 = 0 \\
\frac{dx^4}{dt} &= u^4 = c
\end{aligned} \tag{4.19}$$

D'aquesta manera, substituint les velocitats (4.19) a (4.18), tenint en compte que en el nostre cas $\frac{d^2x^j}{dt^2} = 0$, obtenim les equacions de les geodèsiques:

$$\omega^2\Gamma^j_{22} + 2\omega c\Gamma^j_{24} + c^2\Gamma^j_{44} = 0 \tag{4.20}$$

Calculem els connectors afins de Levi-Civita o simbols de Christoffel de segona espècie que necessitem per a les quatre equacions de les trajectòries, tenint en compte que, d'acord a la teoria dBB, el moviment de l'electró transcorre a velocitat angular constant i, en conseqüència, els elements del tensor mètric no depenen de t per representar una situació estacionària.

Com és sabut, els connectors es poden expressar respecte al tensor mètric de la manera següent:

$$\Gamma^j_{ik} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_i g_{kh} + \partial_k g_{ih} - \partial_h g_{ik}) \tag{4.21}$$

Fem ara la hipòtesi que els components de la mètrica no depenen de l'angle, $\phi = x^2$, de la $z = x^3$ ni del temps $ct = x^4$. Només considerarem com a possible la variació respecte a la coordenada $\rho = x^1$.

Recordem que el radi de gir de la partícula el simbolitzem per ρ_0, mentre que ρ l'utilitzem per a designar un radi variable, particularment en relació a l'entorn de ρ_0. És respecte a aquesta variable que realitzarem la derivació.

Substituint a l'equació que expressa el connector en funció de la mètrica g_{ij} podem escriure els connectors no nuls:

$$\Gamma^j_{22} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_2 g_{2h} + \partial_2 g_{h2} - \partial_h g_{22}) = -\frac{1}{2}g^{jh}\partial_h g_{22} = -\frac{1}{2}g^{j1}\partial_1 g_{22} \tag{4.22}$$

i de la mateixa manera obtenim:

$$\Gamma^j_{24} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_2 g_{4h} + \partial_4 g_{h2} - \partial_h g_{24}) = -\frac{1}{2}g^{jh}\partial_h g_{24} = -\frac{1}{2}g^{j1}\partial_1 g_{24} \tag{4.23}$$

i també:

$$\Gamma^j_{44} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_4 g_{4h} + \partial_4 g_{h4} - \partial_h g_{44}) = -\frac{1}{2}g^{jh}\partial_h g_{44} = -\frac{1}{2}g^{j1}\partial_1 g_{44} \tag{4.24}$$

Substituïm ara els connectors calculats a les 4 equacions de les trajectòries/geodèsiques (4.20):

$$\omega^2 g^{j1}\partial_1 g_{22} + 2\omega c g^{j1}\partial_1 g_{24} + c^2 g^{j1}\partial_1 g_{44} = 0, \tag{4.25}$$

forma contreta de 4 equacions amb $j = 1, 2, 3, 4$.

Per a simplificar aquestes equacions dividint per g^{j1} cal assegurar que els valors d'aquests que ens interessen no són nuls. És a dir, ens cal avaluar el tensor mètric contravariant g^{ij}. Sabem que, si α_{ij} és l'adjunt de g_{ij}, tenim:

$$g^{ij} = \frac{\alpha_{ij}}{g} \tag{4.26}$$

on g és el determinant de la seua matriu, g_{ij}.

D'altra banda, com veurem, les mètriques cilíndriques i les simètriques axialment en general tenen l'estructura següent:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{22} & 0 & g_{24} \\ 0 & 0 & g_{33} & 0 \\ 0 & g_{24} & 0 & g_{44} \end{pmatrix} \tag{4.27}$$

Avaluem el determinant, que serà $\neq 0$ (mètrica lorentziana o pròpiament riemanniana) g:

$$g = \det(g_{ij}) = g_{11} g_{33}(g_{22} g_{44} - g_{24}^2) \neq 0 \tag{4.28}$$

i en conseqüència el tensor g^{ij} té la forma:

$$g^{ij} = \begin{pmatrix} \frac{1}{g_{11}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{g_{44}}{g_{22}g_{44}-g_{24}^2} & 0 & \frac{g_{24}}{g_{22}g_{44}-g_{24}^2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{g_{33}(g_{22}g_{44}-g_{24}^2)} & \\ 0 & \frac{g_{24}}{g_{22}g_{44}-g_{24}^2} & 0 & \frac{g_{24}}{g_{33}(g_{22}g_{44}-g_{24}^2)} \end{pmatrix} \tag{4.29}$$

4.5 Condició general sobre la mètrica

Substituïm g^{11} a l'equació (4.25); ens interessa la $j = 1$ puix les quatre equacions se'ns redueixen a una:

$$\frac{\omega^2}{g_{11}}\partial_1 g_{22} + \frac{2c\omega}{g_{11}}\partial_1 g_{24} + \frac{c^2}{g_{11}}\partial_1 g_{44} = 0 \tag{4.30}$$

Simplifiquem amb $g_{11} \neq 0$, i substituïm les derivades parcials per les totals respecte a ρ. Ens queda:

$$\omega^2 g'_{22} + 2c\omega g'_{24} + c^2 g'_{44} = 0 \tag{4.31}$$

Aquesta equació és la condició de l'equació geodèsica si la mètrica únicament depèn de ρ, però no assumeix encara la condició de constància del moment cinètic pròpia dels estats quàntics. És, doncs, una **condició necessària**, però no suficient per a implementar la hipòtesi abans comentada.

Notem que el fet que només hi intervinguen els components g_{22}, g_{24} i g_{44} deriva del fet que els corresponents components de la quadrivelocitat, u^2 i u^4 són els únics no nuls, d'acord amb la hipòtesi de mètrica estacionària amb simetria cilíndrica, segons (4.27).

4.6 Condició de constància del moment cinètic.

Cal considerar la condició quàntica que tots els electrons que poden pertànyer al mateix estat quàntic corresponent a l'orbital atòmic: tots han de posseir **el mateix moment angular o cinètic**. És a dir, s'ha d'acomplir:

$$m\omega\rho_0^2 = u\hbar \tag{4.32}$$

Queda doncs establida una relació que s'escriu:

$$\omega = \frac{u\hbar}{m\rho_0^2} \tag{4.33}$$

Introduïm la constant b, com ja hem referit anteriorment, per a alleugerir les expressions:

$$b = \frac{u\hbar}{m} \tag{4.34}$$

Ens interessa prendre com a referència, per a algunes constrastacions, l'electró de nivell $2p$: $n = 2$ i $\ell = u = 1$. (Figura 4.1). Per a $u = 1$ i la massa de l'electró obtenim $b = 1{,}158.10^{-4}$ J.s/kg.

Així, podem escriure:

$$\omega = \frac{b}{\rho_0^2} \tag{4.35}$$

Introduïm ara la **condició de constància del moment cinètic en la congruència de trajectòries** representada per l'equació obtinguda a l'apartat anterior (4.31), obtenint:

$$\frac{b^2}{\rho_0^4}g'_{22} + 2c\frac{b}{\rho_0^2}g'_{24} + c^2 g'_{44} = 0 \tag{4.36}$$

i finalment:

$$b^2 g'_{22} + 2cb\rho_0^2 g'_{24} + \rho_0^4 c^2 g'_{44} = 0 \tag{4.37}$$

L'equació anterior la podem expressar així en funció dels connectors:

$$b^2\Gamma^1_{22} + 2cb\rho_0^2\Gamma^1_{24} + \rho_0^4 c^2\Gamma^1_{44} = 0 \tag{4.38}$$

És molt interessant representar-la, alternativament, en funció de la longitud reduïda de Compton $f = \frac{\hbar}{mc}$:

$$u^2 f^2 g'_{22} + 2uf\rho_0^2 g'_{24} + \rho_0^4 g'_{44} = 0 \tag{4.39}$$

Aquesta darrera expressió és una forma molt convenient d'expressió. Notem que es pot estendre al cas més general que el coeficient ρ_0 siga la variable ρ_0, puix que si els components de la mètrica compleixen l'equació:

$$u^2 f^2 g'_{22} + 2uf\rho^2 g'_{24} + \rho^4 g'_{44} = 0\,, \tag{4.40}$$

també complirà l'equació anterior *sobre la geodèsica*, on $\rho = \rho_0$

Aquestes **condicions generals per a la mètrica**, equacions que haurà de complir el tensor mètric per a ser coherent amb la geodèsica que hem introduït com a hipòtesi, ens permeten la següent formalització.

4.7 Teorema de les geodèsiques dBB

Una mètrica lorentziana g_{ij} compatible amb la teoria de de Broglie-Bohm per als àtoms hidrogenoides, de la forma (4.27) i amb la dependència de els components de la mètrica únicament respecte a la coordenada cilíndrica ρ, compleix sobre la geodèsica l'equació següent, en coordenades cilíndriques:

$$u^2 f^2 g'_{22} + 2uf\rho_0^2 g'_{24} + \rho_0^4 g'_{44} = 0 \tag{4.41}$$

on ρ_0 és el radi de l'òrbita de l'electró, f és la longitud de Compton i u és el nombre quàntic magnètic, en el sentit que (4.19) és una geodèsica d'aquesta mètrica.

Aquest teorema és molt útil per a esbrinar si una determinada mètrica compleix la compatibilitat amb la teoria de de Broglie-Bohm. D'aquest en deriven els següents corol·laris:

4.7.1 Corol·lari I

En mètriques compatibles amb la teoria de de Broglie-Bohm, si g_{44} no depèn de ρ, es compleix la relació:

$$ufg'_{22} + 2\rho_0^2 g'_{24} = 0, \tag{4.42}$$

una altra manera útil d'expressar-ho és:

$$\frac{g'_{22}}{g'_{24}} = -\frac{2\rho_0^2}{uf}, \tag{4.43}$$

De (4.42) es dedueix immediatament:

$$g_{24} = -\frac{uf}{2\rho_0^2} g_{22} + K \tag{4.44}$$

K constant d'integració sobre cada geodèsica.

4.7.2 Corol·lari II

En l'expressió (4.41) ρ_0 és el valor del radi de l'òrbita, mentre que ρ és la coordenada d'un punt arbitrari de l'espai. El teorema dBB es pot expressar d'una manera menys restrictiva si ens fixem en què una mètrica que complesca l'equació:

$$u^2 f^2 g'_{22} + 2uf\rho^2 g'_{24} + \rho^4 g'_{44} = 0\,, \tag{4.45}$$

també compleix el teorema dBB puix sobre la geodèsica, $\rho = \rho_0$, on s'ha de complir:

$$u^2 f^2 \left(g'_{22}\right)_{\rho=\rho_0} + 2uf\rho_0^2 \left(g'_{24}\right)_{\rho=\rho_0} + \rho_0^4 \left(g'_{44}\right)_{\rho=\rho_0} = 0 \tag{4.46}$$

Podem per tant expressar:

Corol·lari II:Una mètrica lorentziana g_{ij} compatible amb la teoria de de Broglie-Bohm per als àtoms hidrogenoides, de la forma (4.27) i amb la dependència dels components de la mètrica únicament respecte a la coordenada cilíndrica ρ, compleix, de manera necessària i suficient, sobre la geodèsica l'equació següent, en coordenades cilíndriques:

$$u^2 f^2 g'_{22} + 2uf\rho^2 g'_{24} + \rho^4 g'_{44} = 0 \tag{4.47}$$

on ρ és el radi de l' òrbita de l'electró, f és la longitud de Compton i u és el nombre quàntic magnètic, en el sentit que (4.19) és una geodèsica d'aquesta mètrica.

Notem que, en realitat, aquesta expressió és més convenient perquè les seues solucions no inclouen un valor fixe del radi en la mètrica, de manera que expressa un espai-temps comú per a qualsevol valor del radi.

4.7.3 Corol·lari III

El Corol·lari II el podem particularitzar per al cas que g_{44} siga independent de ρ, és a dir de $g'_{44} = 0$, de manera semblant al Corol·lari I.

Aleshores podem formular el següent:

textitCorol·lari III:*Una mètrica lorentziana g_{ij} compatible amb la teoria de de Broglie-Bohm per als àtoms hidrogenoides, de la forma (4.27) i amb la dependència dels components de la mètrica únicament respecte a la coordenada cilíndrica ρ, i amb el component $g_{44} independent del temps complex$, de manera necessària i suficient, sobre la geodèsica l'equació següent, en coordenades cilíndriques:*

$$ufg'_{22} + 2\rho^2 g'_{24} = 0 \tag{4.48}$$

Algunes expressions útils derivades d'aquest són

$$g_{24} = -\frac{uf}{2}\int \frac{g'_{22}}{\rho^2} d\rho \tag{4.49}$$

, que integrada per parts dona:

$$g_{24} = -uf\left(\frac{g_{22}}{2\rho^2} + \int \frac{g_{22}}{\rho^3} d\rho\right) \tag{4.50}$$

En ambdues expressions, la constant d'integració serà aplicable al conjunt de geodèsiques corresponent al valor variable de ρ.

Aquest corol·lari és molt important, puix que el supòsit que contempla és la situació habitual en aquest tipus de sistemes.

4.7.4 Corol·lari IV

El Teorema de les geodèsiques dBB implica que : textitCorol·lari IV:*en un àtom hidrogenoide amb $u \neq 0$, les geodèsiques admissibles per als electrons depenen exclusivament del nombre quàntic magnètic, essent independents de qualsevol altra característica de la funció d'ona.*

4.8 Generalització del Teorema de les geodèsiques dBB a coordenades ortogonals qualssevol

Formulem la condició de la mètrica geodèsica en la teoria dBB d'un mode més general, el que ens permetrà estendre el Teorema de les geodèsiques dBB a coordenades ortogonals qualssevol. Per a alguns tipus de coordenades, en particular les esfèriques, una simple transformació a coordenades cilíndriques és suficient per a estendre el teorema esmentat.

Situem-nos, doncs, en l'espai-temps euclidià i la teoria de de Broglie-Bohm: l'ona pilot que governa el moviment de l'electró, corresponent al sistema sencer, que identifiquem com a funció d'ona, ve donada, en forma polar com a (A simbolitza l'amplitud de la forma polar i S la fase):

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{iS}{\hbar}} \tag{4.51}$$

Com hem vist anteriorment, en la teoria de Broglie-Bohm i en els àtoms hidrogenoides amb $u > 0$, l'electró es mou sota l'acció de dues forces (3.4): la força derivada de l'atracció elèctrica F_e i la derivada del potencial quàntic F_Q, que en el cas de l'àtom hidrogenoide es concreta, com hem vist, en una força centrípeta F_M que actua sobre l'electró i el fa girar uniformement:

$$\vec{F}_M = \vec{F}_e + \vec{F}_Q \tag{4.52}$$

L'acceleració de l'electró s'ha d'expressar ací com a una **derivada covariant** de la velocitat en **l'espai euclidià** expressat en el sistema de coordenades utilitzat. En aquest espai euclidià, indiquem per lletres gregues les coordenades espacials d'1 fins a 3.

Siga $G^{\alpha}_{\beta\gamma}$ el símbol de Christoffel de segona espècie corresponent al **tipus de coordenades ortogonals escollit**. És fàcil deduir que els seus valors seran tots nuls per al sistema cartesià, que en les coordenades cilíndriques tindrà com a valors no nuls $G^1_{22} = -\rho$ i $G^2_{12} = \frac{1}{\rho}$, etc. Aleshores, l'acceleració corresponent a la força mecànica (centrípeta) actuant sobre l'electró serà:

$$a^{\alpha}_M = \frac{d^2x^{\alpha}}{dt^2} + G^{\alpha}_{\beta\gamma}\frac{dx^{\beta}}{dt}\frac{dx^{\gamma}}{dt} \tag{4.53}$$

Les forces degudes al camp elèctric i al potencial quàntic es podran expressar així:

$$\vec{F}_e + \vec{F}_Q = -\nabla V + \nabla(\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\nabla^2 A}{A})) \tag{4.54}$$

En conseqüència podem escriure:

$$\frac{d^2x^\alpha}{dt^2} + G^\alpha_{\beta\gamma}\frac{dx^\beta}{dt}\frac{dx^\gamma}{dt} - \frac{1}{m}\nabla V + \frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla\left(\frac{\nabla^2 A}{A}\right) = 0 \tag{4.55}$$

Finsací hem considerat la dinàmica de l'electró segons la teoria dBB, en un espai i temps euclidians, descrits per coordenades curvilínies ortogonals generals. Considerem ara aquesta dinàmica *localment* des del punt de vista d'una varietat lorentziana; segons la nostra hipòtesi, l'electró descriu una geodèsica de l'espai-temps. **Utilitzem el mateix tipus de coordenades que al cas anterior** i escrivim l'equació dinàmica tot utilitzant índexs llatins d'1 a 4 per a les coordenades espacials i el temps ct.

$$\frac{d^2x^i}{dt^2} + \Gamma^i_{jk}\frac{dx^j}{dt}\frac{dx^k}{dt} = 0 \tag{4.56}$$

D'ací podem plantejar només les tres equacions espacials denotant-les per subíndexs grecs:

$$\frac{d^2x^\alpha}{dt^2} + \Gamma^\alpha_{jk}\frac{dx^j}{dt}\frac{dx^k}{dt} = 0 \tag{4.57}$$

i explícitament, utilitzant c com a component u^4 de la quadrivelocitat:

$$\frac{d^2x^\alpha}{dt^2} + \Gamma^\alpha_{\beta\gamma}\frac{dx^\beta}{dt}\frac{dx^\gamma}{dt} + 2c\Gamma^\alpha_{\beta 4}\frac{dx^\beta}{dt} + c^2\Gamma^\alpha_{44} = 0 \tag{4.58}$$

Com que establim una equivalència, en l'àmbit dels petits desplaçaments, entre les coordenades euclidianes i les de la varietat lorentziana, podem enunciar una equació que agrupe les dues equacions que representen la dinàmica de l'electró, tot utilitzant la igualació mitjançant $\frac{d^2x^\alpha}{dt^2}$. Ens queda doncs:

$$\begin{gathered}\Gamma^\alpha_{\beta\gamma}\frac{dx^\beta}{dt}\frac{dx^\gamma}{dt} + 2c\Gamma^\alpha_{\beta 4}\frac{dx^\beta}{dt} + c^2\Gamma^\alpha_{44} = \\ G^\alpha_{\beta\gamma}\frac{dx^\beta}{dt}\frac{dx^\gamma}{dt} - \frac{1}{m}\left(\nabla V\right)^\alpha + \frac{\hbar^2}{2m^2}\left(\nabla\left(\frac{\nabla^2 A}{A}\right)\right)^\alpha\end{gathered} \tag{4.59}$$

En aquesta equació introduïm la condició de guiatge dBB: $\vec{p} = \nabla S$. Prendrem ací el gradient en el sistema ortogonal concret tenint en compte els factors d'escala corresponents h_α. En efecte, per a expressar els gradients en coordenades generalitzades cal que utilitzem els corresponents *factors d'escala o d'estructura* ([Simons, 1968], pàg.152):

$$h_\alpha = |\partial_\alpha \vec{r}| \tag{4.60}$$

que coincideixen amb el tensor mètric contravariant euclidià. Aleshores el gradient d'un camp escalar H n'és:

$$\nabla H = h_\alpha^{-1} \partial_\alpha H \ \vec{u}^\alpha \tag{4.61}$$

En conseqüència, el moment de l'electró serà el gradient de la fase, d'acord amb l'equació de guiatge. En components, denotant v^α les velocitats tindrem:

$$mv^\alpha = (\nabla S)^\alpha = h_\alpha^{-1} \partial_\alpha S, \tag{4.62}$$

que podem posar en funció de les coordenades:

$$m \frac{\partial x^\alpha}{\partial t} = h_\alpha^{-2} \partial_\alpha S, \tag{4.63}$$

i doncs:

$$\frac{\partial x^\alpha}{\partial t} = (\nabla S)^\alpha = m^{-1} \, h_\alpha^{-2} \, \partial_\alpha S, \tag{4.64}$$

i també:

$$\nabla V = \frac{1}{h_\alpha} \partial_\alpha V \tag{4.65}$$

Substituint a (4.59):

$$\begin{aligned} &\frac{1}{m^2 h_\alpha^2 h_\beta^2} \Gamma^\alpha_{\beta\gamma} \partial_\beta S \partial_\gamma S + \frac{2c}{m h_\beta^2} \Gamma^\alpha_{\beta 4} \partial_\beta S + c^2 \Gamma^\alpha_{44} = \\ &\frac{1}{m^2 h_\alpha^2 h_\beta^2} G^\alpha_{\beta\gamma} \partial_\beta S \partial_\gamma S - \frac{1}{m h_\alpha} \partial_\alpha V + \frac{\hbar^2}{2m^2} \nabla \left(\left(\frac{\nabla^2 A}{A} \right) \right)^\alpha \end{aligned} \tag{4.66}$$

Arribem a una sèrie de tres equacions on podem relacionar els components de la mètrica que relacionen els connectors amb l'amplitud i fase de la funció d'ona. Per fer aquesta substitució tenim en compte que:

$$\Gamma^j_{ik} = \frac{1}{2} g^{jh} (\partial_k g_{ih} + \partial_i g_{hk} - \partial_h g_{ki}) \tag{4.67}$$

Podem escriure la forma restringida dels connectors afins de components espacials:

$$\Gamma^\alpha_{\beta\gamma} = \frac{1}{2} g^{\alpha h} (\partial_\gamma g_{\beta h} + \partial_\beta g_{h\gamma} - \partial_h g_{\gamma\beta}), \tag{4.68}$$

on l'índex h varia de 1 a 4. Podem posar explícita la dependència del tensor mètric tot substituint als connectors. En primer lloc, constatem que, tenint en compte que la derivació respecte al temps és nul·la, el segon terme esdevé:

$$\frac{2c}{mh_\beta^2}\Gamma^\alpha_{\beta 4}\partial_\beta S = \frac{c}{mh_\beta^2}g^{\alpha h}\left(\partial_\beta g_{h4} - \partial_h g_{4\beta}\right)\partial_\beta S \tag{4.69}$$

i el tercer terme:

$$c^2\Gamma^\alpha_{44} = -\frac{c^2}{2}g^{\alpha h}\partial_h g_{44} \tag{4.70}$$

Llavors podem escriure:

$$\begin{aligned} &g^{\alpha h}\left(\frac{1}{2m^2h_\alpha^2h_\beta^2}(\partial_\gamma g_{\beta h} + \partial_\beta g_{h\gamma} - \partial_h g_{\gamma\beta})\partial_\beta S\partial_\gamma S + \frac{c}{mh_\beta^2}\left(\partial_\beta g_{h4} - \partial_h g_{4\beta}\right)\partial_\beta S - \frac{c^2}{2}\partial_h g_{44}\right) = \\ &\frac{1}{m^2h_\alpha^2h_\beta^2}G^\alpha_{\beta\gamma}\partial_\beta S\partial_\gamma S - \frac{1}{mh_\alpha}\partial_\alpha V + \frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla\left(\left(\frac{\nabla^2 A}{A}\right)\right)^\alpha \end{aligned} \tag{4.71}$$

Aquesta és *en coordenades ortogonals generalitzades* una generalització del *Teorema de les geodèsiques dBB*, estès als diferents sistemes coordenats ortogonals i en funció dels components polars de la funció d'ona. Constitueix la relació explícita entre els components del tensor mètric al voltant d'un electró estacionari integrat en un sistema i l'ona-pilot o funció d'ona del qual ve donat pels components A i S, en forma polar, d'acord amb el plantejament de de Broglie-Bohm.

La importància física d'aquesta equació rau en allò que significa de relació entre la funció d'ona i la deformació de l'espai-temps que "guial·la partícula.

Donada una funció d'ona $\Psi = A\,e^{i\frac{S}{\hbar}}$, les mètriques possibles de l'espai-temps hauran d'acomplir l'anterior equació (4.71). Naturalment, una elecció del tipus de coordenades coherent amb la simetria del sistema, simplificarà el càlcul. En aquest sentit, les coordenades cilíndriques semblen especialment adequades als sistemes atòmics, a causa de la constància del moment cinètic (nombre quàntic magnètic). Tanmateix, qualsevol altre tipus de coordenades ortogonals pot ser apropiat: esfèric, cilíndric el·líptic o qualsevol altre.

4.8.1 Comprovació de la relació obtinguda per a les coordenades cilíndriques

Particularitzarem ara l'equació anterior (4.71) al cas de les coordenades cilíndriques (en part la deducció és també vàlida per a les esfèriques).

Al primer membre, a causa del caràcter multiplicatiu de ∂S_α i ∂S_β, tindrem $\alpha = \beta = 2$, perquè qualsevol derivada respecte a les altres dues variables espacials és nul·la. A més, la derivació dels components de la mètrica no nuls són només les derivades respecte al radi x^1. Amb aquestes consideracions, (4.71) esdevé:

$$-g^{\alpha 1}\left(\frac{1}{2m^2h_2^4}\partial_1 g_{22}(\partial_2 S)^2 + \frac{c}{mh_2^2}\partial_1 g_{24}\partial_2 S + \frac{c^2}{2}\partial_1 g_{44}\right) = \tag{4.72}$$

$$\frac{1}{m^2h_\alpha^2h_\beta^2}G^\alpha_{\beta\gamma}\partial_\beta S\partial_\gamma S - \frac{1}{mh_\alpha}\partial_\alpha V + \frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla\left(\left(\frac{\nabla^2 A}{A}\right)\right)^\alpha \tag{4.73}$$

El valor de α el fixem igual a 1, perquè en un sistema ortogonal $g^{12} = g^{23} = 0$. Així mateix, substituïm la derivació parcial per la total respecte a ρ, que indicarem per cometa. Quedarà:

$$-g^{11}\left(\frac{1}{2m^2h_2^4}g'_{22}(\partial_2 S)^2 + \frac{c}{mh_2^2}g'_{24}\partial_2 S + \frac{c^2}{2}g'_{44}\right) = \tag{4.74}$$

$$\frac{1}{m^2h_1^2h_\beta^2}G^1_{\beta\gamma}\partial_\beta S\partial_\gamma S - \frac{1}{mh_1}\partial_1 V + \frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla\left(\left(\frac{\nabla^2 A}{A}\right)\right)^{(1)} \tag{4.75}$$

L'ús de coordenades cilíndriques, a causa de la simetria del tema que ens ocupa, és la més senzilla i més rica en contingut físic.

Les constants d'estructura són:

$$h_1 = 1 \tag{4.76}$$
$$h_2 = \rho \tag{4.77}$$
$$h_3 = 1 \tag{4.78}$$

com fàcilment podem comprovar en representant el vector diferencial:

$$d\vec{r} = d\rho\vec{u_\rho} + \rho d\phi\vec{u_\phi} + dz\vec{u_z} \tag{4.79}$$

Els únics connectors euclidians no nuls són:

$$G^1_{22} = -\rho \tag{4.80}$$
$$G^2_{12} = \frac{1}{\rho} \tag{4.81}$$

Els components de la velocitat impliquen que:

$$\partial_1 S = 0 \tag{4.82}$$
$$\partial_2 S = \partial_2(u\hbar\phi - Et) = u\hbar \tag{4.83}$$
$$\partial_3 S = 0 \tag{4.84}$$

Substituïnt a l'equació (4.74) obtenim:

$$\frac{1}{2m^2\rho^4}g'_{22}(u\hbar)^2 + \frac{c}{m\rho^2}g'_{24}u\hbar + \frac{c^2}{2}g'_{44} = \tag{4.85}$$
$$-\frac{1}{g^{11}}\left(\frac{1}{m^2h_1^2h_\beta^2}G^1_{\beta\gamma}\partial_\beta S\partial_\gamma S - \frac{1}{mh_1}\partial_1 V + \frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla\left(\left(\frac{\nabla^2 A}{A}\right)\right)^{(1)}\right) \tag{4.86}$$

Multipliquem ara els dos membres per $\frac{2}{c^2}$ i introduïm la longitud reduïda de Compton que hem simbolitzat per $f = \frac{\hbar}{mc}$. Quedarà:

$$\frac{u^2f^2}{\rho^4}g'_{22} + \frac{2uf}{\rho^2}g'_{24}u\hbar + g'_{44} = \tag{4.87}$$
$$-\frac{2}{c^2g^{11}}\left(\frac{1}{m^2h_1^2h_\beta^2}G^1_{\beta\gamma}\partial_\beta S\partial_\gamma S - \frac{1}{mh_1}\partial_1 V + \frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla\left(\left(\frac{\nabla^2 A}{A}\right)\right)^{(1)}\right) \tag{4.88}$$

i multiplicant per ρ^4 els dos membres i arranjant:

$$u^2f^2g'_{22} + 2uf\rho^2g'_{24} + \rho^4g'_{44} = \tag{4.89}$$
$$-\frac{2\rho^4}{mc^2g^{11}}\left(\frac{1}{mh_1^2h_\beta^2}G^1_{\beta\gamma}\partial_\beta S\partial_\gamma S - \frac{1}{h_1}\partial_1 V + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\left(\left(\frac{\nabla^2 A}{A}\right)\right)^{(1)}\right) \tag{4.90}$$

El parèntesi del segon membre representa l'equilibri de la força centrípeta (primer terme), la força elèctrica (segon terme) i la força quàntica (tercer terme), referides sempre a la variable ρ. En efecte, el primer terme el podem escriure:

$$\frac{1}{mh_1^2h_\beta^2}G^1_{\beta\gamma}\partial_\beta S\partial_\gamma S = -\frac{u^2\hbar^2}{m\rho^3} \tag{4.91}$$

que, tenint en compte que $\dot{\phi} = \frac{u\hbar}{m\rho^2}$, correspon a la força centrípeta de l'electro com ja mostrarem en (3.48).

Quant al segon terme, correspon al component del gradient del potencial projectat sobre la direcció del radi de gir ρ, així com el tercer terme és la component del gradient del potencial quàntic en la dita direcció.

Podem doncs escriure:

$$u^2 f^2 g'_{22} + 2uf\rho^2 g'_{24} + \rho^4 g'_{44} = 0 \tag{4.92}$$

que és precisament l'expressió del teorema de les geodèsiques dBB, abans enunciat. Hem comprovat doncs que l'equació (4.71) particularitzada per a coordenades cilíndriques ens condueix al dit teorema de nou.

4.9 Condicions addicionals sobre la mètrica

Una condició addicional que imposarem a les mètriques a investigar és que l'energia total d'un sistema clàssic equivalent siga major que 0. Malgrat que no fem la hipòtesi que els sistemes quàntics complesquen l'equació de camp d'Einstein, per consideracions de continuïtat suposarem que l'energia total equivalent és positiva, com correspon a sistemes que contenen partícules materials, encara que siga en interacció.

Així doncs, a més de complir el teorema de les geodèsiques dBB, la mètrica haurà de definir un tensor d'impulsió-energia en l'equació de camp d'Einstein amb la component positiva:

$$T^{44} > 0 \tag{4.93}$$

que en el nostre cas equival a:

$$G^{44} = g^{42} G^{2}{}_{4} + g^{44} G^{4}{}_{4} \tag{4.94}$$

$$G^{44} = R^{44} + \frac{1}{2} R g^{44} \tag{4.95}$$

essent G^{ij} el tensor d'Einstein

Hom podria requerir que la curvatura escalar R complesca:

$$R \geq 0 \tag{4.96}$$

.

però no és imprescindible. La condició sembla desitjable per tal d'assegurar l'estabilitat de la trajectòria electrònica front a pertorbacions elàstiques.

4.10 Conclusió

Les mètriques que compleixen el Teorema de geodèsiques dBB (4.41) i les condicions anteriors poden representar els moviments de l'electró del l'àtom hidrogenoide, en una varietat lorentziana, on apareixen com a geodèsiques.

En principi existeixen, doncs, infinites mètriques i per tant **infinites varietats lorentzianes** que compleixen aquest requeriment. Entre totes aquestes, ens interessaran aquelles que tinguen un **contingut energètic total positiu**, evidenciat per la component energètica del tensor d'impulsió-energia i, preferiblement, que tinguen una **curvatura positiva** per assegurar l'estabilitat de la seua òrbita enfront de pertorbacions menors (compatibles amb la constància del moment cinètic, per exemple "zitterbewegung"). En curvatura negativa, com és sabut, moltes geodèsiques van a l'infinit, com il·lustrem a la figura (4.2); el que per a la partícula seria equivalent a escapar del sistema atòmic sense aportació energètica.

Figura 4.2: Geodèsiques en superficie amb curvatura negativa (M. Schilling catalog.Disseny de W.Dick sota supervisió de L. Brill, TU Munich, 1877)

Capítol 5

Aproximació a una mètrica per a la teoria de de Broglie-Bohm

5.1 Introducció

En aquest capítol iniciem el nostre propòsit de recerca d'una mètrica corresponent al moviment dels electrons en els estats estacionaris dels àtoms hidrogenoides, coherent amb la teoria dBB, amb una primera aproximació a la determinació de la mètrica, que ens servirà com a anticipació dels passos posteriors.

Com hem remarcat anteriorment, tots els electrons susceptibles d'estar en un mateix orbital han de tindre el mateix moment cinètic; per tant, els valors de ω i de ρ estan relacionats, és a dir, no poden ser independents. En conseqüència, tractarem de trobar **un espai-temps comú a tots els electrons d'un mateix nombre quàntic** u, per tant amb el mateix moment cinètic.

En aquest capítol explorarem dues mètriques properes com a primera aproximació.

5.2 Mètrica 1

Partim doncs del Teorema de les geodèsiques dBB del capítol anterior relatiu a l'equació general de les geodèsiques per al tipus de mètrica que ens ocupa segons (4.41):

$$u^2 f^2 g'_{22} + 2uf\rho_0^2 g'_{24} + \rho_0^4 g'_{44} = 0 \tag{5.1}$$

on u és el nombre quàntic magnètic i f la longitud reduïda de Compton. Aquesta equació general, d'acord amb allò que hem dit anteriorment, la podem simplificar suposant $g'_{44} = 0$ (Corol·lari I). És a dir:

$$ufg'_{22} + 2\rho_0^2 g'_{24} = 0 \tag{5.2}$$

Per tal de simplificar el càlcul i poder extraure'n condicions generals, farem una **hipòtesi simple**: $g_{22} = \rho^2$. Aquesta hipòtesi és coherent amb el fet que l'electró està sotmés a una acceleració dirigida vers l'eix de gir, centrípeta, corresponent a un **potencial total** funció de ρ^2, i per tant podem suposar $\Gamma^1_{22} = -\rho$.

Amb aquesta elecció, aplicant (4.44) tenim:

$$g_{24} = -\frac{uf\rho^2}{2\rho_0^2} + k \tag{5.3}$$

on k és una **constant d'integració** a determinar.

Respecte a la resta de components, suposarem constants i iguals g_{11} i $g_{33} = 1$, com s'esdevé en molts casos, i també constant $g_{44} = -1$.

Queda, doncs, la mètrica:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 & 0 & -\frac{uf\rho^2}{2\rho_0^2} + k \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{uf\rho^2}{2\rho_0^2} + k & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{5.4}$$

la qual cosa ens permet començar els càlculs dels elements que caracteritzen l'espai-temps definit.

En aquesta mètrica cal fer una reflexió molt important respecte la seua validesa en el marc de la teoria dBB. L'expressió $\frac{uf}{2\rho_0}$ fa el paper de paràmetre de la mètrica, però dit paràmetre no és aplicable a tota una congruència de corbes amb el mateix nombre quàntic magnètic u. Així doncs, electrons amb el mateix nombre quàntic u per diferent radi de gir ρ_0 estarien en espais temps que diferirien en la mètrica. En conseqüència és un model que no compleix plenament amb els requisits exigits per nosaltres, però que desenvoluparem com a introducció.

L'altre paràmetre que apareix en la mètrica és k, que te les dimensions físiques de longitud.

5.2.1 Connectors de Levi-Civita i geodèsiques

Com hem expressat anteriorment, els connectors afins de Levi-Civita, equivalents a símbols de Christoffel de segona espècie determinen el transport paral·lel dels vectors en una varietat lorentziana, de manera que permeten la formulació de la derivada covariant. De la mètrica (5.4) deriven els següents connectors:

$$\Gamma^1_{22} = -\rho \tag{5.5}$$

$$\Gamma^1_{24} = \frac{uf\rho}{2\rho_0^2} \tag{5.6}$$

$$\Gamma^2_{12} = \frac{f^2u^2\rho^3 + (4\rho_0^4 - 2f\rho_0^2 ku)\rho}{f^2u^2\rho^4 + (4\rho_0^4 - 4f\rho_0^2 ku)\rho^2 + 4\rho_0^4 k^2} \tag{5.7}$$

$$\Gamma^2_{14} = -\frac{2f\rho_0^2 u\rho}{f^2u^2\rho^4 + (4\rho_0^4 - 4f\rho_0^2 ku)\rho^2 + 4\rho_0^4 k^2} \tag{5.8}$$

$$\Gamma^4_{12} = \frac{4\rho_0^4 k\rho}{f^2u^2\rho^4 + (4\rho_0^4 - 4f\rho_0^2 ku)\rho^2 + 4\rho_0^4 k^2} \tag{5.9}$$

$$\Gamma^4_{14} = \frac{f^2u^2\rho^3 - 2f\rho_0^2 ku\rho}{f^2u^2\rho^4 + (4\rho_0^4 - 4f\rho_0^2 ku)\rho^2 + 4\rho_0^4 k^2} \tag{5.10}$$

$$\Gamma^1_{44} = 0, \tag{5.11}$$

amb els quals plantegem l'equació de la geodèsica:

$$\omega\Gamma^1_{22} + 2c\Gamma^1_{24} = \omega(-\rho) + 2c\frac{uf\rho}{2\rho_0^2} = 0, \tag{5.12}$$

que, tenint en compte que sobre la trajectòria $\rho = \rho_0$, condueix a:

$$\omega = -\frac{ufc}{\rho_0^2} \tag{5.13}$$

que és el resultat correcte. Les equacions horàries de la congruència de geodèsiques seran, com estableix la teoria dBB:

$$\rho = \rho_0 \tag{5.14}$$

$$\phi = -\frac{ufct}{\rho_0^2}, \tag{5.15}$$

que era allò que calia esperar, a causa de l'aplicació de les condicions de geodèsica.

El nombre quàntic magnètic u actua, doncs, com a paràmetre discretitzat als valors $u = \pm 1, 2, 3, ...$. (El valor $u = 0$ l'excloem perquè correspondria, com sabem, amb una situació estàtica).

Així doncs, a cada nivell orbital caracteritzat per u correspondrà un espai-temps descrit per l'anterior tensor mètric. Les components g_{24} mostren una dependència de ρ_0, però en el seu entorn esdevé constant: $g_{24} \to -\frac{uf}{2}+k$.

5.2.2 Curvatura escalar

El càlcul de la curvatura escalar el farem a partir dels connectors afins o símbols de Christoffel de segona espècie, que són obtinguts a partir de la mètrica covariant i la contravariant. Un cop obtingut el tensor de Ricci, obtenim la curvatura escalar per contracció d'aquest tensor. Els connectors afins els hem calculat en el punt anterior.

Un altre camí, generalment molt més laboriós, és obtenir el tensor de Riemann i obtenir el tensor de Ricci a partir d'ell.

La curvatura escalar del nostre model ve donada per l'expressió (notem que k té dimensions de longitud en aquest model):

$$R = -\frac{2f^4u^4\rho^6 + 16f^2\rho_0^2u^2\,P\,\rho^4 + 40f^2\rho_0^4k^2u^2\rho^2 + 32\rho_0^6k^2\,P}{f^4u^4\rho^8 + 8f^2\rho_0^2u^2\,P\,\rho^6 + 8\rho_0^4(u^2f^2k^2 + 2P^2)\rho^4 + 32\rho_0^6k^2\,P\,\rho^2 + 16\rho_0^8k^4} \tag{5.16}$$

on

$$P = \rho_0^2 - ufk \tag{5.17}$$

El signe de la curvatura depèn del valor de k.

5.2.3 Component energètic del tensor d'impulsió-energia i escalar de curvatura

La component T^{44} del tensor d'impulsió-energia d'un sistema *no microscòpic* descriu de mode aproximat el seu contingut energètic. Per avaluar el seu valor és suficient calcular el tensor d'Einstein G^{44}. Aquest valor només el prenem com a referència, puix que no assimilem el sistema quàntic a un sistema microscòpic pel que fa a l'equació de camp d'Einstein. Certament, això esdevindria amb partícules petites sense consideracions quàntiques, però per a partícules quàntiques només ho podem assumir com una referència, amb valor heurístic. Amb aquesta limitació, considerem l'expressió de G^{44} en funció del tensor mixt, que avaluem directament:

$$G^{44} = g^{42}G_2^4 + g^{44}G_4^4 \tag{5.18}$$

Arribem a l'expressió:

$$G^{44} = -\frac{16k^2\rho_0^8}{u^4f^4\rho^8 + 8u^2f^2\rho_0^2\, P\, \rho^6 \ + 8\rho_0^4\, D\, \rho_4 + 32k^2\rho_0^6\, P\, \rho^2 + 16k^4\rho_0^8} \tag{5.19}$$

amb:

$$P = \rho_0^2 - ufk \tag{5.20}$$

$$D = 3u^2f^2k^2 - 4ufk\rho_0^2 + 2\rho_0^4 \tag{5.21}$$

El signe d'aquesta expressió és sempre negatiu, per a qualsevol valor de k

5.2.4 Avaluació de la mètrica 1

La mètrica lorentziana:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 & 0 & -\frac{uf\rho^2}{2\rho_0^2} + k \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{uf\rho^2}{2\rho_0^2} + k & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{5.22}$$

descriu adequadament les geodèsiques de l'electró en un àtom hidrogenoide segons la teoria dBB; però no aporta un espai-temps comú als electrons amb el mateix nombre quàntic magnètic u, puix que el seu paràmetre inclou precisament el radi d'un electró particular.

El signe de la curvatura és funció de l'elecció del valor de k.

El signe de la component G^{44} i en conseqüència del valor T^{44} del tensor d'impulsió energia és negatiu per a qualsevol valor de k.

En conseqüència, la mètrica proposada no sembla adequada per a descriure la geometria lorentziana corresponent a la trajectòria de l'electró en un àtom hidrogenoide segons la teoria de de Broglie -Bohm, per a $u > 0$, com hem expressat en les condicions generals expressades al capítol anterior.

5.3 Mètrica 2, seguint el corol·lari II

L'estudi de l'anterior mètrica 1 ens duu a la conclusió que ens cal trobar una mètrica que es puga considerar una geometria comú a tots els electrons que tenen el mateix número quàntic magnètic u. En la mètrica que volem estudiar ara tractem de superar aquesta deficiència tot aplicant el corol·lari II, per tal d'evitar la presència del radi com a paràmetre, tor estudiant la mètrica en la immediació de la trajectòria. Aplicant el corol·lari II al cas de $g_{22} = \rho^2$ i $g'_{44} = 0$ obtenim:

$$g_{24} = -\frac{uf}{2}\int \frac{g'_{22}}{\rho^2} d\rho = -\frac{uf}{2}\int \frac{2\rho}{\rho^2} d\rho = -uf\log(k\rho) \tag{5.23}$$

on k és una **constant d'integració** a determinar.

Respecte a la resta de components, suposarem iguals g_{11} i $g_{33} = 1$ i $g_{44} = -1$

Queda, doncs, la mètrica:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 & 0 & -uf\log(k\rho) \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -uf\log(k\rho) & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{5.24}$$

la qual cosa ens permet començar els càlculs dels elements que caracteritzen l'espai-temps definit.

5.3.1 Connectors de Levi-Civita i geodèsiques

De la mètrica (5.24) deriven els següents connectors:

$$\Gamma^1_{22} = -\rho \tag{5.25}$$

$$\Gamma^1_{24} = \frac{uf}{2\rho} \tag{5.26}$$

$$\Gamma^1_{44} = 0, \tag{5.27}$$

amb els qui plantegem l'equació de la geodèsica:

$$\omega\Gamma^1_{22} + 2c\Gamma^1_{24} = \omega(-\frac{\rho}{v}) + 2c\frac{uf}{2v\rho} = 0, \tag{5.28}$$

que condueix a:

$$\omega = \frac{ufc}{\rho^2} \tag{5.29}$$

Les equacions horàries de la congruència de geodèsiques seran, com estableix la teoria dBB:

$$\rho = \rho_0 \tag{5.30}$$

$$\phi = \frac{ufct}{\rho_0^2}, \tag{5.31}$$

que era allò que calia esperar, a causa de l'aplicació de les condicions de geodèsica.

El nombre quàntic u actua doncs com a paràmetre discretitzat. Així doncs, a cada nivell orbital amb nombre quàntic magnètic $u \neq 0$ correspondria un espai-temps descrit per l'anterior tensor mètric. Tots els electrons amb el mateix nombre quàntic magnètic i amb qualsevol valor del radi de gir es trobarien al mateix espai-temps.

5.3.2 Curvatura escalar

La curvatura escalar ve donada per:

$$R = \frac{u^2 f^2(-3u^2 f^2 + 12u^2 f^2 \log(k\rho) - 4\log^2(k\rho))\rho^2 + u^2 f^2 \log^2(k\rho) + 4\log^3(k\rho))}{2\rho^2\,\Omega^2} \tag{5.32}$$

amb

$$\Omega = \rho^2 + u^2 f^2 \log^2(k\rho) \tag{5.33}$$

Evidentment, la dimensió de Ω és $[L]^2$.

La curvatura escalar és positiva en la gran major part de l'interval corresponent als orbitals amb $u = 1$ i esdevé negativa a partir d'un valor lleugerament superior a $\rho = 5 \cdot 10^{-10}\, m$. En particular, per a $k = 3{,}03 \cdot 10^9$, hom obté els resultats representats a la figura (6.2).

L'interval entre fins a $5 \cdot 10^{-10}\, m$ és coherent amb l'orbital $2p$, però només parcialment amb el $3p$.

5.3.3 Component energètic del tensor d'impulsió-energia i escalar de curvatura

El càlcul del tensor d'Einstein de tipus mixt ens condueix als valors següents:

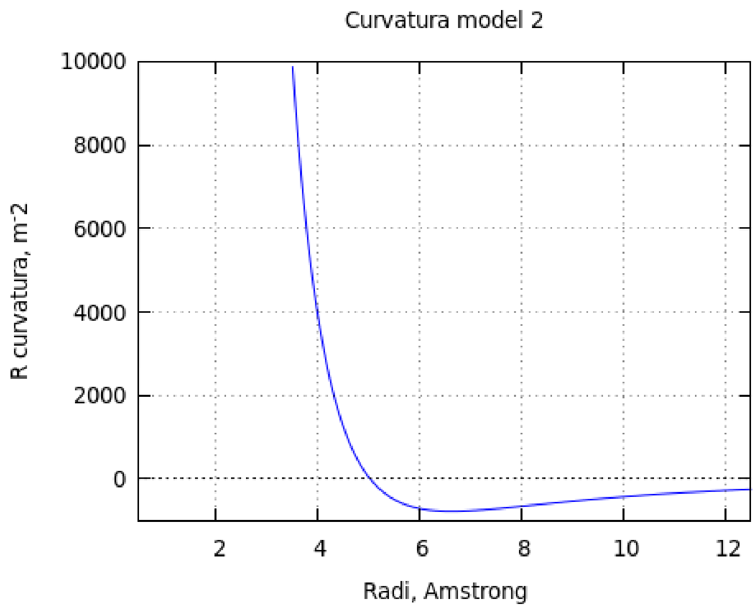

Figura 5.1: Curvatura escalar en funció del radi. $k = 3{,}03\,.10^9$

$$G^4{}_2 = \frac{u^3 f^3 \log(k\rho)\left((2\log^2(k\rho) - \log(k\rho) + 1\right) + 2uf\rho^2}{2\Omega^2} \tag{5.34}$$

$$G^4{}_4 = -\frac{u^2 f^2 \left(2u^2 f^2 \log^3(k\rho) + (u^2 f^2 - 4\rho^2)\log^2(\rho) + 8\rho^2\log(k\rho) - \rho^2\right)}{4\rho^2\Omega^2} \tag{5.35}$$

Ens interessa el component contravariant G^{44} del tensor d'Einstein, tot utilitzant el tensor mètric contravariant per a pujar índexs:

$$G^{44} = g^{42}G^4{}_2 + g^{44}G^4{}_4 \tag{5.36}$$

que condueix a

$$G^{44} = -\frac{u^2 f^2 \left(\log^2(k\rho) - \log(k\rho) + 1\right)}{\Omega^2} \tag{5.37}$$

El plantejament de l'equació de camp d'Einstein condueix a l'expressió següent del component energètic del tensor d'impulsió-energia:

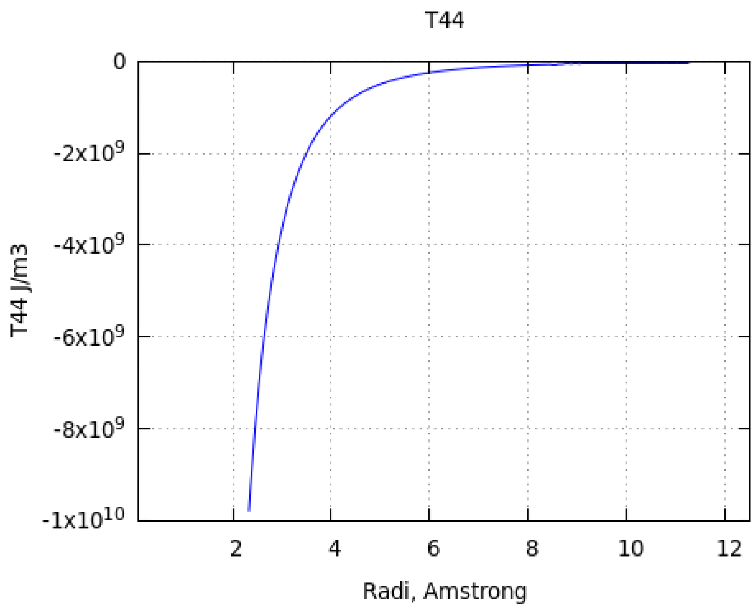

Figura 5.2: T44 per a $k = 3,03.\,10^{10}$

$$T^{44} = -\frac{c^4 u^2 f^2 \left(\log^2(k\rho) - \log(k\rho) + 1\right)}{8\pi G \Omega^2} \tag{5.38}$$

on G és la constant de gravitació universal.

T^{44} és negatiu per a tot valor de ρ i tota elecció de k. A la figura hem representat T^{44} en funció del radi per a $k = 3{,}03 \cdot 10^{10}$.

5.3.4 Avualuació de la mètrica 2

Hem obtingut una mètrica coherent amb la teoria de de Broglie-Bohm en què es defineix **un espai-temps comú a totes les òrbites geodèsiques** que formen els mateixos estats amb el nombre quàntic u (excloent-hi $u = 0$, en què l'electró no es mou respecte al protó). És a dir: tots els electrons d'un orbital estan en el mateix espai-temps i per a cada orbital obtenim un espai-temps diferent.

La mètrica descrita representa tot orbital caracteritzat per u, a diferència de la mètrica anterior, especifica del valor concret del radi de gir. La curvatura presenta un valor positiu per a gran part de l'interval de radi on hi ha probabilitat radial positiva dels orbitals.

La component de densitat energètica del tensor d'impulsió-energia contravariant relativista, pres com a referència, presenta un valor negatiu per a tots els valors del paràmetre. Com que el contingut energètic i màssic del conjunt atòmic és positiu, això comporta una considerable dificultat explicativa, malgrat que al compliment de l'equació de camp d'Einstein li donem un valor referencial.

Per això, encara que l'estructura matemàtica obtinguda és una mètrica lorentziana, **la solució obtinguda no és físicament acceptable** i requereix un plantejament més profund, que realitzarem en capítols posteriors.

5.4 Conclusió sobre aquest tipus de mètriques.

Mentre que la condició expressada pel Teorema de geodèsiques dBB és un eficaç generador de mètriques que compleixen la condició de geodèsica de la teoria dBB per a àtoms hidrogenoides, la condició que la component energètica del tensor d'energia-impuls siga positiva és difícil de previndre a priori o derivar analíticament. Com a conseqüència convé acudir a mètriques que corresponguen a sistemes materials coneguts, tot i que l'adaptació al cas que ens ocupa siga aproximat.

Capítol 6

Mètriques basades en una solució exacta de l'equació de camp d'Einstein. Una solució tipus pols per a simetria cilíndrica

6.0.1 Introducció

Per a avançar en l'obtenció de mètriques coherents amb la teoria de de Broglie-Bohm amb sentit físic, sempre basant-nos en les condicions d'existència expressades anteriorment, acudim a les anomenades solucions exactes de l'equació de camp d'Einstein, malgrat que el seu compliment per als sistemes quàntics, com hem dit, el considerem només referencial.

En realitat, des d'un punt de vista ampli, tota mètrica amb un mínim de coherència física constitueix "una solució exacta de l'equació de camp d'Einstein"en implicar una definició del corresponent tensor d'impulsió-energia.

Les solucions exactes a l'equació de camp d'Einstein, en un sentit estricte, són aquelles que, donades unes condicions específiques restrictives lligades amb un tipus específic de tensor d'impulsió-energia, permeten deduir la corresponent mètrica. Llurs condicions de simetria es poden matematitzar mitjançant els vectors de *Killing*, que són els camps al llarg dels quals s'anul·la la derivada de *Lie* de la mètrica.

Considerar-les com a referència es deu al fet que, en situació límit de transició de les condicions microfísiques a macrofísiques haurien de complir aquesta equació. És una consideració en certa forma semblant a la que ens fa posar en correspondència un Hamiltonià quàntic amb el clàssic equivalent.

Donat que estem considerant situacions estacionàries, esperem simetries respecte al temps: una translació temporal d'un cert període ha de reproduir la situació inicial. També cal que esperem una independència de la mètrica respecte a l'angle ϕ i de la translació respecte a l'eix de gir, a causa de la compensació que exerceixen entre si el potencial elèctric i el quàntic, que produeix un potencial total únicament dependent del radi ρ. Parlant en termes dels **vectors de Killing** tenim:

$$\mathcal{L}_k g = 0 \tag{6.1}$$

ens trobem amb tres d'aquests vectors de Killing no nuls, dos dels quals espacials:

$$\xi = \partial_t \tag{6.2}$$
$$\eta = \partial_\phi \tag{6.3}$$
$$\nu = \partial_z, \tag{6.4}$$

en total els corresponents a un **grup abelià** G_3.

Per a acostar-nos a les solucions al respecte cal que considerem el tipus de simetria que esperem de la mètrica, tenint en compte el caràcter de les geodèsiques observades i del potencial actuant.

6.1 Mètrica 3. Una solució basada en un model de pols

Entre les mètriques solucions exactes de l'equació de camp d'Einstein és remarcable, per al nostre propòsit, la de tipus pols. **L'equivalent físic d'aquest model seria l'espai-temps induït per un flux de partícules desplaçant-se amb una certa vorticitat**. Aquesta condició ens fa pensar que pot constituir una mètrica adequada per a descriure geodèsiques del tipus que satisfacen les condicions de la teoria de de Broglie-Bohm, encara que siga de manera aproximada.

Aquesta hipòtesi ha estat prèviament explorada en dos articles de l'autor i el director de tesi:[Gómez Blanch, 2018] i [Gómez Blanch and Fullana Alonso, 2019].

Recordem que considerarem la trajectòria d'un electró en l'estat $2p$ (o qualsevol altre estat, amb el nombre quàntic u diferent de 0), que té la forma d'una circumferència amb el protó situat sobre l'eix perpendicular al seu centre, sotmés a la força atractiva del nucli i a la força equilibrant corresponent al potencial quàntic. Partim de la solució proposada al respecte per **Lanczos** [Lanczos, 1924] i més tard per **van Stockum** [van Stockum, 1937], descrita en [Kramer, 1980], corresponent a l'espai-temps generat per partícules que giren al voltant d'un eix:

$$ds^2 = e^{-a^2\rho^2}(d\rho^2 + dz^2) + \rho^2 d\phi^2 - (cdt + a\rho^2 d\phi)^2 \tag{6.5}$$

on a és un paràmetre que determinarem a partir de les equacions de la trajectòria/geodèsica i de la física del sistema considerat.

Desenvolupant ens queda:

$$ds^2 = e^{-a^2\rho^2}d\rho^2 + \rho^2(1 - \rho^2 a^2)d\phi^2 - 2c\rho^2 ad\phi dt + e^{-a^2\rho^2}dz^2 - c^2dt^2 \tag{6.6}$$

on les equivalències seran:

$$\rho = x^1 \tag{6.7}$$

$$\phi = x^2 \tag{6.8}$$

$$z = x^3 \tag{6.9}$$

$$ct = x^4 \tag{6.10}$$

Remarquem que si $a = 0$ obtenim la mètrica de Minkowski. Els elements del tensor mètric els identifiquem a partir de:

$$ds^2 = g_{ij}dx^i dx^j \tag{6.11}$$

i seran:

$$g_{11} = g_{33} = e^{-a^2\rho^2} \tag{6.12}$$

$$g_{22} = \rho^2(1 - a^2\rho^2), \tag{6.13}$$

tenint en compte que, en el desenvolupament de ds^2 apareix un coeficient 2 en els termes mixtes, $2g_{24}dx^2dx^4$:

$$g_{24} = -a\rho^2, \tag{6.14}$$

recordant que $x^4 = ct$:

$$g_{44} = -1, \tag{6.15}$$

i, a més:

$$g_{12} = g_{13} = g_{23} = g_{14} = g_{34} = 0, \tag{6.16}$$

com al model anterior.

Ens queda el tensor mètric covariant següent:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} e^{-a^2\rho^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 - \rho^4 a^2 & 0 & -a\rho^2 \\ 0 & 0 & e^{-a^2\rho^2} & 0 \\ 0 & -a\rho^2 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6.17}$$

i el tensor mètric contravariant g^{ij} definit per $g^{ij}g_{ij} = \delta_i^j$ és:

$$g^{ij} = \begin{pmatrix} e^{a^2\rho^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\rho^2} & 0 & -a \\ 0 & 0 & e^{a^2\rho^2} & 0 \\ 0 & -a & 0 & a^2\rho^2 - 1 \end{pmatrix} \tag{6.18}$$

Cal remarcar que el determinant de g_{ij} val

$$det g_{ij} = -\rho^2 e^{-2a^2\rho^2}((1-a^2)\rho^2 - 1) \tag{6.19}$$

El **caràcter causal** canvia en:

$$\rho = \frac{1}{a} \tag{6.20}$$

6.1.1 Caràcter aproximat del model per al nostre objectiu. Geodèsiques de les òrbites

Notem que al model de mètrica proposada $g'_{44} = 0$. Aleshores és fàcil reconèixer que **aquesta mètrica no compleix rigorosament la condició per poder-se considerar compatible amb la teoria dBB**, en els termes que hem utilitzat en capítols anteriors. En efecte, segons el corol·lari III (4.48) la condició n'era:

$$\frac{g'_{22}}{g'_{24}} = -\frac{2\rho^2}{uf}, \tag{6.21}$$

i al nostre cas:

$$\frac{g'_{22}}{g'_{24}} = -\frac{2\rho - 4a^2\rho^3}{-2a\rho} = \frac{1}{a} - 2a\rho^2, \tag{6.22}$$

que no pot coincidir amb l'equació anterior per cap elecció d'a. Tanmateix, veurem que és d'utilitat el seu estudi, puix que ens conduirà a solucions més apropiades al nostre propòsit. Reconeixerem, a més, aquest cas com a una notable aproximació.

De l'equació anterior sorgeix l'aproximació següent:

$$a = \frac{1}{uf} \tag{6.23}$$

Aquesta aproximació té una notable validesa. En efecte, els dos termes del segon membre de (6.26) adquireixen els valors:

$$\frac{1}{a} = uf \tag{6.24}$$

$$2a\rho^2 = -\frac{\rho^2}{uf} \tag{6.25}$$

Per a $\rho = 10^{-10}\,m$ i $u = 1$, el primer terme val $3,86 \cdot 10^{-17}$ m, mentre que el segon terme val $5,22.\,10^{-4}\,m$, molts ordres de magnitud superior. Per això es pot escriure:

$$\frac{g'_{22}}{g'_{24}} \approx -2a\rho^2, \tag{6.26}$$

és a dir, es compleix *aproximadament* el teorema de les geodèsiques dBB.

Així doncs, explorarem la mètrica:

$$g_{11} = g_{33} = e^{-\frac{\rho^2}{u^2 f^2}} \tag{6.27}$$

$$g_{22} = \rho^2 - \frac{\rho^4}{u^2 f^2} \tag{6.28}$$

$$g_{24} = -\frac{\rho^2}{uf} \tag{6.29}$$

$$g_{44} = -1 \tag{6.30}$$

en forma matricial:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{\rho^2}{u^2 f^2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 - \frac{\rho^4}{u^2 f^2} & 0 & -\frac{\rho^2}{uf} \\ 0 & 0 & e^{-\frac{\rho^2}{u^2 f^2}} & 0 \\ 0 & -\frac{\rho^2}{uf} & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6.31}$$

6.1.2 Connectors de Levi-Civita

Com és conegut, els connectors afins que hom utilitza en Relativitat General, són els de Levi-Civita, amb torsió nul·la. L'elecció dels connectors de Levi-Civita està motivada pel fet que permeten unificar les *geodèsiques afins* (transport vectorial paral·lel entre punts) i *geodèsiques mètriques* (distància extremal entre punts). Llur relació amb la mètrica ve donada per:

$$\Gamma^j_{ik} = \Gamma^j_{ki} = \frac{1}{2} g^{jh} (\partial_k g_{jh} + \partial_j g_{hk} - \partial_h g_{ki}) \tag{6.32}$$

Al càlcul d'aquests connectors tindrem en compte la simetria del tensor mètric i que l'única variable als elements del tensor mètric és el radi. Per tant, si:

$$h \neq 1 \Rightarrow \partial_h g_{ij} = 0 \ \ \forall i, j \in (1, 4) \tag{6.33}$$

D'altra banda, per al seu càlcul ens calen les derivades parcials del tensor mètric covariant respecte al radi. Calculem a continuació els connectors afins, que són simètrics amb els subíndexs (torsió nul·la), a partir de (6.56). Obtenim les 10 expressions genèriques dels connectors següents:

$$\Gamma^j_{11} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_1 g_{1h} + \partial_1 g_{h1} - \partial_h g_{11}) = \frac{1}{2}g^{j1}\partial_1 g_{11} \tag{6.34}$$

$$\Gamma^j_{12} = \Gamma^j_{21} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_2 g_{1h} + \partial_1 g_{h2} - \partial_h g_{21}) = \frac{1}{2}g^{j2}\partial_1 g_{22} + \frac{1}{2}g^{j4}\partial_1 g_{42} \tag{6.35}$$

$$\Gamma^j_{13} = \Gamma^j_{31} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_3 g_{1h} + \partial_1 g_{h3} - \partial_h g_{31}) = \frac{1}{2}g^{j3}\partial_1 g_{33} \tag{6.36}$$

$$\Gamma^j_{14} = \Gamma^j_{41} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_4 g_{1h} + \partial_1 g_{h4} - \partial_h g_{41}) = \frac{1}{2}g^{j2}\partial_1 g_{24} \tag{6.37}$$

$$\Gamma^j_{22} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_2 g_{2h} + \partial_2 g_{h2} - \partial_h g_{22}) = -\frac{1}{2}g^{j1}\partial_1 g_{22} \tag{6.38}$$

$$\Gamma^j_{23} = \Gamma^j_{32} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_3 g_{2h} + \partial_2 g_{h3} - \partial_h g_{32}) = 0 \tag{6.39}$$

$$\Gamma^j_{24} = \Gamma^j_{42} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_2 g_{4h} + \partial_4 g_{h2} - \partial_h g_{24}) = -\frac{1}{2}g^{11}\partial_1 g_{24} \tag{6.40}$$

$$\Gamma^j_{33} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_3 g_{3h} + \partial_3 g_{h3} - \partial_h g_{33}) = -\frac{1}{2}g^{j1}\partial_1 g_{33} \tag{6.41}$$

$$\Gamma^j_{34} = \Gamma^j_{43} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_3 g_{4h} + \partial_4 g_{h2} - \partial_h g_{34}) = -\frac{1}{2}g^{11}\partial_1 g_{34} = 0 \tag{6.42}$$

$$\Gamma^j_{44} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_4 g_{4h} + \partial_4 g_{h4} - \partial_h g_{44}) = -\frac{1}{2}g^{11}\partial_1 g_{44} = 0 \tag{6.43}$$

Substituïm ara els valors dels components del tensor mètric covariant que hem definit. Obtenim:

$$\Gamma^1_{11} = -a^2\rho \tag{6.44}$$

$$\Gamma^2_{12} = \Gamma^2_{21} = \frac{1}{\rho} - a^2\rho \tag{6.45}$$

$$\Gamma^4_{12} = \Gamma^4_{21} = a^3\rho^3 \tag{6.46}$$

$$\Gamma^3_{13} = \Gamma^3_{31} = -a^2\rho \tag{6.47}$$

$$\Gamma^2_{14} = \Gamma^2_{41} = -\frac{a}{\rho} \tag{6.48}$$

$$\Gamma^4_{14} = \Gamma^4_{41} = a^2\rho \tag{6.49}$$

$$\Gamma^1_{22} = (2a^2\rho^3 - \rho)e^{a^2\rho^2} \tag{6.50}$$

$$\Gamma^1_{24} = \Gamma^1_{42} = a\rho e^{a^2\rho^2} \tag{6.51}$$

$$\Gamma^1_{33} = a^2\rho \tag{6.52}$$

6.1.3 Geodèsiques

L'equació de les geodèsiques queda de la manera següent:

$$\omega\Gamma^1_{22} + 2c\Gamma^1_{24} = 0 \tag{6.53}$$

Substituint $a = \frac{1}{uf}$ arribem a les equacions de les geodèsiques:

$$\omega = -2c\frac{\Gamma^1_{24}}{\Gamma^1_{22}} = -\frac{ufc}{\rho^2 - \frac{u^2f^2}{2}} \tag{6.54}$$

Segons el teorema de les geodèsiques dBB el resultat correcte fora $\omega = -\frac{ufc}{\rho^2}$. Aleshores, el terme del denominador $\frac{u^2f^2}{2}$ és una discrepància del resultat que satisfà el teorema esmentat. Tanmateix, observem la seua petitesa respecte a l'altre terme del denominador ρ^2, puix que f^2 és de l'ordre de $10^{-26}\ m^2$ mentre que ρ^2 és de l'ordre de $10^{-20}\ m^2$, és a dir 10^6 vegades més gran.

6.1.4 Tensor de Ricci

El tensor de Ricci R_{ij}, que pot ser obtingut per contracció del tensor de Riemann R_{ijkl}, al seu cop derivat de la mètrica, es pot derivar també dels connectors mètrics/afins de Levi-Civita (símbols de Christoffel de segon ordre), mètode que seguirem ací. Tenim doncs:

$$R_{ij} = \partial_h\Gamma^h_{ij} - \partial_j\Gamma^h_{ih} + \Gamma^h_{ij}\Gamma^m_{hm} - \Gamma^m_{ih}\Gamma^h_{jm}, \tag{6.55}$$

on els connectors venen donats en funció de la mètrica per:

$$\Gamma^j_{ik} = \frac{1}{2}g^{jh}(\partial_k g_{ih} + \partial_i g_{hk} - \partial_h g_{ki}) \tag{6.56}$$

El tensor mètric contravariant ve donat per:

$$g^{ij} = \frac{\alpha_{ij}}{g} \tag{6.57}$$

essent α_{ij} l'adjunt de g_{ij} al determinant de la seua matriu, que té el valor g. L'equació que relaciona el tensor de Ricci amb la curvatura és la seua contracció:

$$R = g^{ij}R_{ij} \tag{6.58}$$

El càlcul per aquest camí ens condueix als valors no nuls del tensor de Ricci següents:

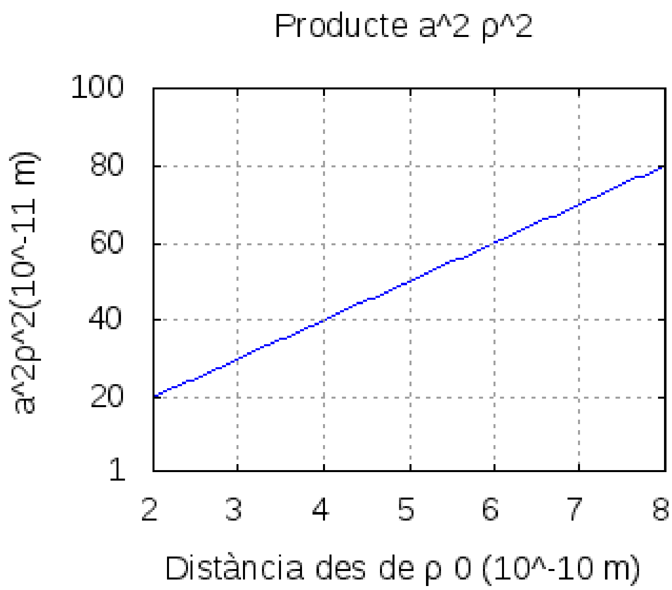

Figura 6.1: Dependència de $a^2\rho^2$ amb ρ

$$R_{11} = 2a^2 \tag{6.59}$$
$$R_{22} = 2a^2\rho^2(a^2\rho^2 + 1)e^{a^2\rho^2} \tag{6.60}$$
$$R_{24} = 2a^3\rho^2 e^{a^2\rho^2} \tag{6.61}$$
$$R_{33} = 2a^2 \tag{6.62}$$
$$R_{44} = 2a^2 e^{a^2\rho^2} \tag{6.63}$$

6.1.5 Tensor de Riemann

Com és sabut, la curvatura d'una varietat lorentziana ve donada pel tensor de curvatura anomenat de Riemann, R_{ijkl}, que ens apareix en estudiar la circulació d'un vector genèric al voltant d'un contorn tancat.

Observem una forta dependència de la majoria dels termes del producte $a^2\rho^2$, que representem a la figura 6.1.

La consideració del tensor de Riemann ens referma en l'existència de curvatura. Per a l'avaluació d'aquesta hem fet servir en seccions anteriors el tensor de Ricci i, a través d'aquest, l'escalar de curvatura, que apareix en l'equació de camp d'Einstein.

6.1.6 Curvatura escalar

A partir de la mètrica podem calcular l'escalar de curvatura per contracció del tensor covariant de Ricci amb el tensor mètric contravariant. Obtenim, amb els termes no nuls, l'equació següent:

$$R = g^{ij} R_{ij} = g^{11} R_{11} + g^{22} R_{22} + 2g^{24} R_{24} + g^{33} R_{33} + g^{44} R_{44} \tag{6.64}$$

que ens proporciona l'escalar de curvatura:

$$R = 4a^2 e^{a^2 \rho^2} = \frac{4e^{\frac{\rho^2}{u^2 f^2}}}{u^2 f^2} \tag{6.65}$$

El valor de la curvatura és positiu, adquirint un valor molt elevat.

6.1.7 Tensor d'Einstein

El procés de càlcul ens permet trobar el tensor mixt d'Einstein, de caràcter simètric:

$$G_2^4 = -4a^3 \rho^2 e^{a^2 \rho^2} \tag{6.66}$$

$$G_4^4 = -4a^2 \ e^{a^2 \rho^2} \tag{6.67}$$

És notable la relació quantitativa entre el component del tensor G_4^4 i la curvatura.

Calculem el tensor completament contravariant d'Einstein, del qual coneixem les implicacions físiques.

Recordem que la mètrica contravariant n'és (6.18):

$$g^{ij} = \begin{pmatrix} e^{a^2 \rho^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\rho^2} & 0 & -a \\ 0 & 0 & e^{a^2 \rho^2} & 0 \\ 0 & -a & 0 & a^2 \rho^2 - 1 \end{pmatrix} \tag{6.68}$$

Pujant índex al tensor d'Einstein mixt obtenim el tensor d'Einstein contravariant:

$$G^{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4a^2(1-a^2\rho^2)e^{a^2\rho^2} \end{pmatrix} \tag{6.69}$$

És a dir, el component G^{44} (corresponent al component de densitat energètica del tensor impulsió-energia) n'és:

$$G^{44} = 4a^2 e^{a^2\rho^2} = \frac{4e^{\frac{\rho^2}{u^2 f^2}}}{u^2 f^2} \tag{6.70}$$

El valor de T^{44} és molt elevat i positiu. Per tant, també el component T^{44} del tensor d'impulsió-energia que prenim com a referència:

$$T^{44} = \frac{c^4}{8\pi G} G^{44} \tag{6.71}$$

és positiva amb un valor molt alt.

6.1.8 Avaluació de la mètrica 3

El model teòric de la mètrica 3:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{\rho^2}{u^2 f^2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 - \frac{\rho^4}{u^2 f^2} & 0 & \frac{\rho^2}{uf} \\ 0 & 0 & e^{-\frac{\rho^2}{u^2 f^2}} & 0 \\ 0 & \frac{\rho^2}{uf} & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6.72}$$

compleix aproximadament amb el requisit de les geodèsiques de la teoria dBB.

La mètrica considerada descriu un espai-temps comú per a tots els electrons del mateix nombre magnètic u.

La curvatura escalar i el component energètic del tensor d'Einstein resulten negatius i molt elevats.

Per tant, concloem que **la mètrica 3 descriu un espai-temps compatible amb la teoria de de Broglie-Bohm per als àtoms hidrogenoides, però d'un deficient significat físic.**

6.2 Mètrica 4. Una modificació de la mètrica anterior

6.2.1 Introducció

Degut a la gran curvatura i densitat energètica presents en la mètrica 3, explorem una modificació que permeta acostar-se a una descripció més adequada d'un espai-temps per al sistema quàntic sota estudi.

6.2.2 Mètrica 4: una adequació de la solució exacta de pols amb simetria cilíndrica

Proposem la següent mètrica:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} e^{\frac{\beta\rho^2}{u^2f^2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 - \frac{\rho^4}{u^2f^2} & 0 & -\frac{\rho^2}{uf} \\ 0 & 0 & e^{\frac{\beta\rho^2}{u^2f^2}} & 0 \\ 0 & -\frac{\rho^2}{uf} & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6.73}$$

on β és un paràmetre a determinar. Notem que si $\beta < 0$ en realitat es tracta d'una generalització de mètrica tipus 3, que la inclou de manera particular.

6.2.3 Connectors i geodèsica

Els símbols de Christoffel involucrats en la determinació de la mètrica són:

$$\Gamma^1_{22} = \frac{(2\rho^3 - u^2f^2\rho)e^{-\frac{\beta\rho^2}{u^2f^2}}}{u^2f^2} \tag{6.74}$$

$$\Gamma^1_{24} = \frac{\rho e^{-\frac{\beta\rho^2}{u^2f^2}}}{uf} \tag{6.75}$$

La velocitat angular ω serà:

$$\omega = -\frac{2c\Gamma^1_{24}}{\Gamma^1_{22}} = -\frac{ufc}{\rho^2(1 - \frac{u^2f^2}{2\rho^2})} \tag{6.76}$$

és a dir, molt aproximadament $\omega = -\frac{ufc}{\rho^2}$, que és el resultat corresponent a la teoria dBB.

6.2.4 Curvatura

La curvatura ve descrita de la manera següent:

$$R = \frac{2(1-\beta)e^{-\frac{\beta\rho^2}{u^2f^2}}}{u^2f^2} \tag{6.77}$$

El requisit de curvatura positiva queda doncs complit amb $\beta < 1$. Notem que per a $\beta = 1$ la curvatura és nul·la. Així doncs l'interval $0 < \beta < 1$ permet ajustar la curvatura en valors positius.

6.2.5 Component energètic

El component G^{44} del tensor d' Einstein l'obtenim elevant l'índex del tensor mixt G_i^4 mitjançant la mètrica inversa. Obtenim:

$$G^{44} = g^{42}G_2^4 + g^{44}G_4^4 = \frac{(u^2f^2(3-\beta) + (\beta+1)\rho^2)e^{-\frac{\beta\rho^2}{u^2f^2}}}{u^4f^4} \tag{6.78}$$

Per a l'interval considerat anteriorment , $0 < \beta < 1$ obtenim valors positius per a un valor de $\beta > 0$ del component no dinàmic G^{44} del tensor d'Einstein. Això possibilita que hom hi puga ajustar valors convenients. Com a il·lustració presentem els gràfics de la curvatura escalar i de G^{44} per a $\beta = 1,12.\,10^{-15}$ a les figures (6.2) i (6.3).

6.2.6 Avaluació d'aquesta mètrica 4

La mètrica:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} e^{\frac{\beta\rho^2}{u^2f^2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 - \frac{\rho^4}{u^2f^2} & 0 & -\frac{\rho^2}{uf} \\ 0 & 0 & e^{\frac{\beta\rho^2}{u^2f^2}} & 0 \\ 0 & -\frac{\rho^2}{uf} & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6.79}$$

podem dir que representa una geometria lorentziana que inclou aproximadament les geodèsiques de la teoria dBB i que permet , mitjançant el paràmetre β obtenir valors de curvatura i densitat energètica de referència positius, el que possibilita realitzar un ajust a algun valor preestablert, dins d'un ampli interval. La variació de la curvatura és molt gran en aquest interval.

Aleshores és un model que compleix els nostres requisits d'una manera aproximada.

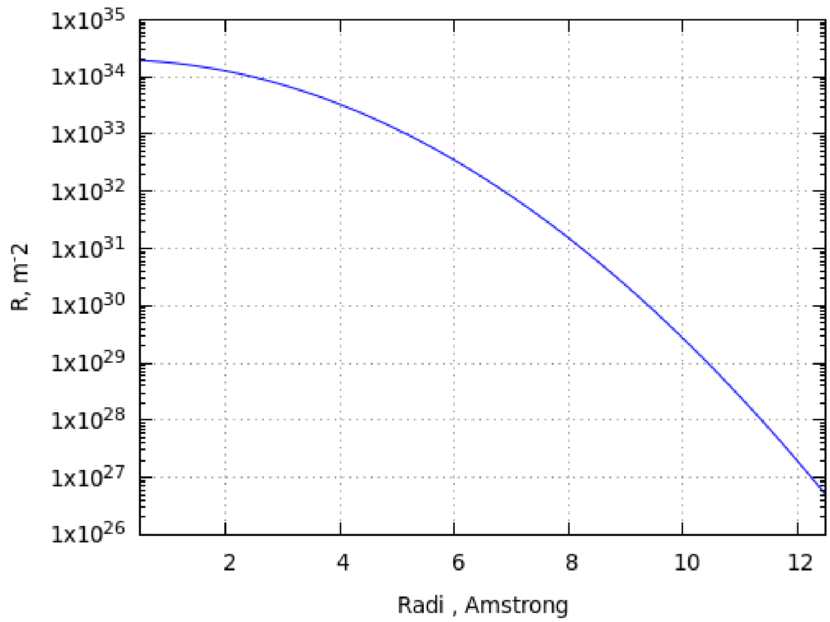

Figura 6.2: Curvatura escalar per a $\beta = 1{,}12 \cdot 10^{-15}$

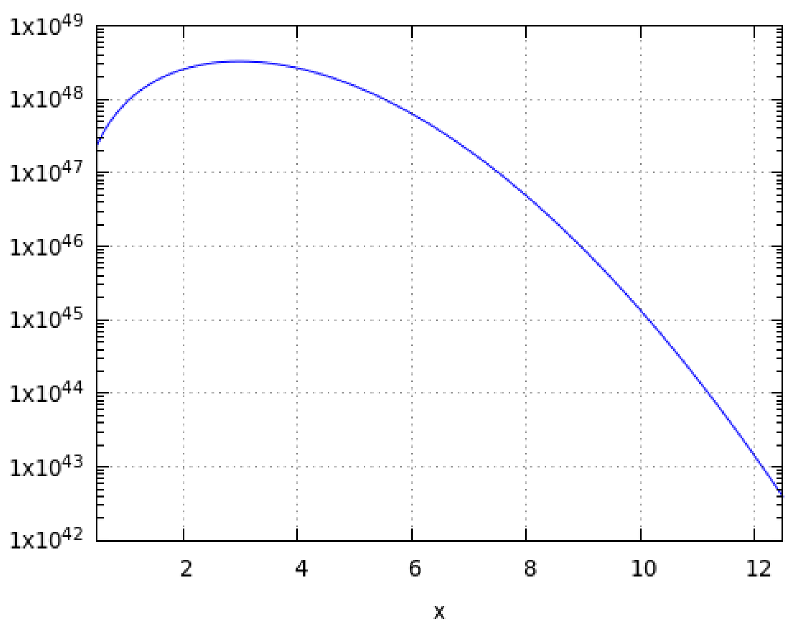

Figura 6.3: G44 per a $\beta = 1, 12.\, 10^{-15}$

6.3 Conclusió sobre les mètriques basades en la solució exacta de pols amb simetria cilíndrica.

La mètrica proposada com a solució exacta de pols amb simetria cilíndrica no admet exactament les geodèsiques dBB com a pròpies, però ho fa amb una notable aproximació. Permet representar aproximadament un espai-temps de curvatura positiva i contingut energètic positiu, on poden moure's els electrons en espai-temps comuns per a cada valor del nombre quàntic magnètic, amb independència del radi. Però la curvatura i el contingut energètic de referència no són apropiats per a representar el sistema físic en el cas del model 5 però si en el cas del model 6.

Capítol 7

Models basats en la generació d'una "solució exacta per a les geodèsiques"a partir dels models anteriors

7.1 Introducció

En aquest capítol hem volgut elaborar una mètrica inspirada en la solució de pols (mètriques 3 i 4) però incorporant elements del primer model (mètrica 2). En particular hi hem introduït una correspondència entre les derivades dels components g_{22} i g_{24} per tal d'assegurar la coherència de les geodèsiques. Això dona lloc a un plantejament amb dos paràmetres, que s'han d'ajustar a les condicions físiques.

7.2 Mètrica 5. Generació d'una "solució exacta per a les geodèsiques"a partir dels models anteriors

La modificació de la mètrica del capítol anterior amb els elements esmentats és la mètrica covariant següent:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} e^{-a^2\rho^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 & 0 & -uf\log(k\rho) \\ 0 & 0 & e^{-a^2\rho^2} & 0 \\ 0 & -uf\log(k\rho) & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.1}$$

Remarquem que hem conservat els components g_{22} i g_{24} del model 2. Comprovem que es compleix el corol·lari III (4.48). En efecte així és:

$$\frac{g'_{22}}{g'_{24}} = \frac{2\rho}{-uf\frac{1}{\rho}} = -\frac{2\rho^2}{uf} \tag{7.2}$$

Això ens garanteix que les geodèsiques són circumferències que compleixen la condició de constància del moment cinètic. La mètrica anterior té com a mètrica contravariant:

$$g^{ij} = \begin{pmatrix} e^{a^2\rho^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\Omega} & 0 & -\frac{uf\log(k\rho)}{\Omega} \\ 0 & 0 & e^{a^2\rho^2} & 0 \\ 0 & -\frac{uf\log(k\rho)}{\Omega} & 0 & -\frac{\rho^2}{\Omega} \end{pmatrix} \tag{7.3}$$

amb

$$\Omega = \rho^2 + u^2 f^2 log^2(k\rho). \tag{7.4}$$

7.2.1 Connectors de Levi-Civita

Els connectors de Levi-Civita no nuls, utilitzant (7.4) són els següents:

$$\Gamma^1_{11} = -a^2\rho \tag{7.5}$$

$$\Gamma^1_{22} = \rho e^{a^2\rho^2} \tag{7.6}$$

$$\Gamma^1_{24} = \frac{fue^{a^2\rho^2}}{2\rho} \tag{7.7}$$

$$\Gamma^1_{33} = a^2\rho \tag{7.8}$$

$$\Gamma^2_{12} = \frac{2\rho^2 + f^2u^2\log(k\rho)}{2\rho\Omega} \tag{7.9}$$

$$\Gamma^2_{14} = -\frac{fu}{2\rho\Omega} \tag{7.10}$$

$$\Gamma^3_{13} = -a^2\rho \tag{7.11}$$

$$\Gamma^4_{12} = -\frac{2fu\rho\log(k\rho) - fu\rho}{2\Omega} \tag{7.12}$$

$$\Gamma^4_{14} = \frac{f^2u^2\log(k\rho)}{2\rho\Omega} \tag{7.13}$$

Els connectors significatius per al càlcul de les geodèsiques són els que tenen els subíndexs 22 , 24 o 44, per estar multiplicant combinacions de la quadri-velocitat no nul·les. En el nostre cas, només podem formar, com als casos anteriors, l'equació amb el superíndex 1:

$$\Gamma^1_{22}\omega^2 + 2\Gamma^1_{24}c\omega = 0, \tag{7.14}$$

que condueix a:

$$\omega = -\frac{2c\frac{fue^{a^2\rho^2}}{2\rho}}{\rho e^{a^2\rho^2}} = -\frac{ufc}{\rho^2}, \tag{7.15}$$

que és el resultat esperat per assegurar el caràcter circular de les geodèsiques de la congruència i llur independència del paràmetre.

7.2.2 Curvatura escalar

La curvatura ve donada per l'expressió:

$$R = e^{a^2\rho^2}\left[2a^2 + \frac{u^2f^2}{2\Omega^2}\left(-3 + 12\log(k\rho) - 4\log^2(k\rho) + \frac{u^2f^2(1+2\log(k\rho))}{2\rho^2}\right)\right] \tag{7.16}$$

on utilitzem la funció simplificativa Ω, utilitzada ja anteriorment (7.4):

$$\Omega = \rho^2 + f^2 u^2 \log^2(k\rho) \tag{7.17}$$

7.2.3 Tensor de Ricci

A continuació calculem el tensor de Ricci, utilitzant la funció abans definida (7.4):

$$R_{11} = \frac{f^2 u^2}{2\rho^2}\left[1 + 2\frac{(a^2 \log(k\rho)(\log(k\rho)-1)\rho^4 - (f^2u^2a^2\log^3(k\rho) + \log^2(k\rho) - 2\log(k\rho) + 1)\rho^2 + u^2 f^2}{\Omega^2}\right] \tag{7.18}$$

$$R_{2,2} = -\frac{f^2 u^2 e^{2\rho^2}(1 - 2\log(k\rho) + 2\log^2(k\rho))}{2\Omega} \tag{7.19}$$

$$R_{2,4} = -\frac{f u e^{a^2\rho^2}(2\rho^2 + f^2u^2\log^2(k\rho))}{2\rho^2\Omega} \tag{7.20}$$

$$R_{3,3} = \frac{a^2(2\rho^2 + f^2u^2\log(k\rho) + f^2u^2\log^2(k\rho))}{\Omega}) \tag{7.21}$$

$$R_{4,4} = \frac{f^2u^2e^{a^2\rho^2}}{2\rho^2\Omega} \tag{7.22}$$

7.2.4 Tensors d'Einstein i d'impulsió-energia.

El component contravariant del tensor d'Einstein resulta, conservant la definició (7.4):

$$G^{44} = e^{a^2\rho^2}\frac{a^2\rho^4 + u^2f^2(\log(k\rho) - \frac{1}{4}) + u^2f^2(a^2\rho^2 - 1)\log^2(k\rho)}{\Omega^2}, \tag{7.23}$$

i el valor del corresponent component del tensor d'impulsió-energia:

$$T^{44} = c^4 e^{a^2\rho^2}\frac{a^2\rho^4 + u^2f^2(\log(k\rho) - \frac{1}{4}) + u^2f^2(a^2\rho^2 - 1)\log^2(k\rho)}{8\pi G\Omega^2}, \tag{7.24}$$

7.2.5 Determinació dels paràmetres del model

Els paràmetres a i k determinen els valors de la curvatura escalar i del component G^{44} del tensor d'Einstein.

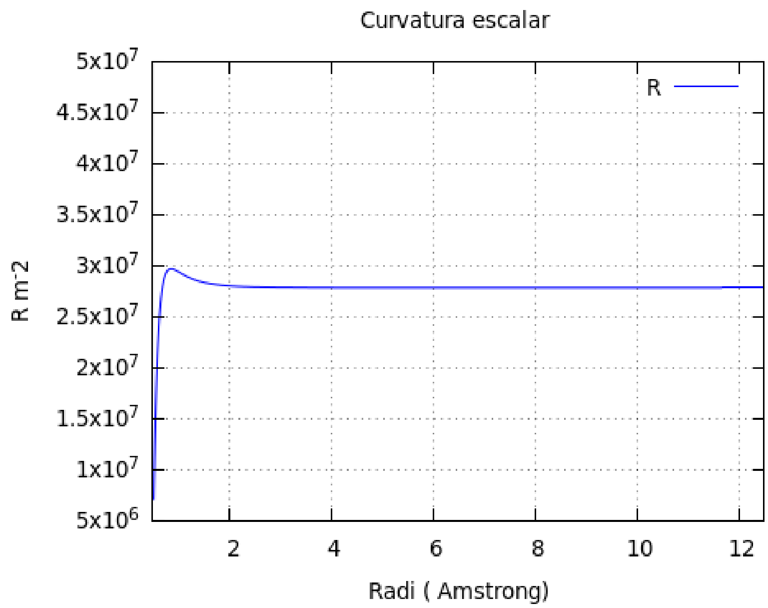

Figura 7.1: Curvatura escalar en funció del radi.

El seu sentit físic és d'inversa de longitud en ambdós casos. En aquest sentit, podríem definir uns paràmetres adimensionals considerant com a referència una longitud característica, f o el radi de Bohr a_0. Tanmateix no ho fem per a no complicar encara més les equacions.

Considerem l'interval de ρ entre els valors $5 \cdot 10^{-11}\, m$ i $12{,}5 \cdot 10^{-10}\, m$. En aquest interval és on són significatives les probabilitats de trobar l'electró en els orbitals que estem considerant. Una elecció apropiada de paràmetres ens pot conduir a valors **positius** de la curvatura i de la densitat energètica. Com a referència, considerarem els valors $a = 3{,}73 \cdot 10^3$ i $k = 1{,}923 \cdot 10^{10}$. L'elecció de k correspon a la inversa de a_0 i a és un valor que assegura que tant la curvatura com T^{44} són positives. En la figura (7.1) es representa la curvatura escalar en funció del radi.

I en la figura (7.2) hem representat la densitat energètica de referència (segons la Relativitat General) en funció del radi per als paràmetres calculats.

És remarcable la uniformitat de la curvatura i de la densitat energètica de referència al llarg de l'interval. El model no permet un ajust a unes condicions de Minkowski per a un determinat radi límit, per a curvatura i densitat energètica de referència positives en l'interval de radis sota estudi.

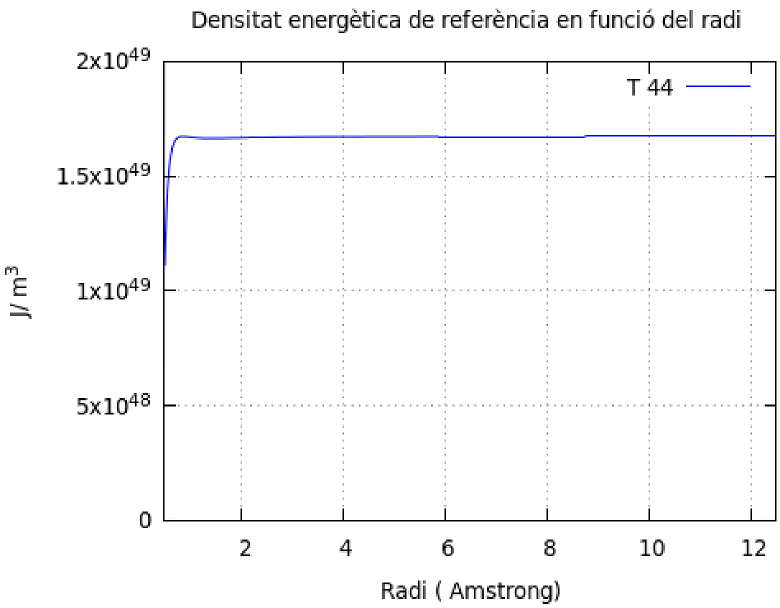

Figura 7.2: Densitat energètica en funció del radi.

D'altra part això és coherent amb la teoria dBB, que no pressuposa cap radi límit.

Si adoptarem per a a valors menors, ens trobaríem amb valors negatius tant en la curvatura com en la densitat energètica de referència. Si adoptarem per a a un valor imaginari, ens trobariem en les condicions del model 6, que estudiarem a continuació.

7.2.6 Caracterització algebraica

La classificació algebraica realitzada mitjançant el programa "Maxima"(ctensor) ens aporta la conclusió que es tracta d'un tipus I de Petrov.

7.2.7 Avaluació d'aquesta mètrica 5

Aquest model permet:

- Definir un espai-temps comú per a totes les trajectòries corresponents a orbitals amb el mateix nombre quàntic u, entès com una mateixa geometria lorentziana.

- Una congruència de trajectòries en cada orbital que són geodèsiques de la mètrica lorentziana corresponent.
- Definir un contingut energètic de referència en la Relativitat General, que sabem inaplicable a sistemes quàntics en interacció.

En conseqüència, constitueix un model acceptable per a expressar el moviment de l'electró en l'àtom hidrogenoide en el marc d'una geometria lorentziana, talment com ens havíem proposat.

7.3 Mètrica 6: "solució exacta per a les geodèsiques"amb exponent positiu de g^{11} i g^{33}.

En aquest capítol estudiem una mètrica que incorpora un paràmetre β equivalent al valor $-a^2$ del model anterior. En realitat, el model és equivalent a aquell, prenent per a un valor imaginari. Siga la mètrica lorentziana:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} e^{\beta\rho^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 & 0 & -uf\log(k\rho) \\ 0 & 0 & e^{\beta\rho^2} & 0 \\ 0 & -uf\log(k\rho) & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.25}$$

on β és un paràmetre de dimensió $[L]^{-2}$. Aquesta mètrica es redueix a la mètrica 5 per a valors de $\beta < 0$ i a la mètrica 2 per a $\beta = 0$, pel que considerarem només els valors $\beta > 0$.

Com que els components g_{22} i g_{24} són iguals que en la mètrica 5, és evident que compleix el corol·lari II.

7.3.1 Connectors i geodèsica

Els connectors significatius per a la geodèsica:

$$\Gamma^1_{22} = -\rho e^{-\beta\rho^2} \tag{7.26}$$

$$\Gamma^1_{24} = \frac{ufe^{-\beta\rho^2}}{2\rho} \tag{7.27}$$

tenint en compte:

$$\Gamma^1_{22}\omega^2 + 2c\Gamma^1_{24}\omega = 0, \tag{7.28}$$

verifiquem el caràcter circular de la geodèsica tot calculant la velocitat angular:

$$\omega = \frac{2c\frac{ufe^{-\beta\rho^2}}{2\rho}}{\rho e^{\frac{-\beta\rho^2}{u^2f^2}}} = \frac{ufc}{\rho^2}, \tag{7.29}$$

7.3.2 Curvatura escalar

La curvatura ve donada per l'expressió:

$$R = e^{-\beta\rho^2}\left[-2\beta + \frac{u^2f^2}{2\Omega^2}\left(-3 + 12\log(k\rho) - 4\log^2(k\rho) + \frac{u^2f^2(1+2\log(k\rho)}{2\rho^2}\right)\right] \tag{7.30}$$

on hem utilitzat la funció simplificativa Ω (7.4):

$$\Omega = \rho^2 + f^2u^2\log^2(k\rho) \tag{7.31}$$

7.3.3 Mètrica contravariant

Aquesta resulta:

$$g^{ij} = \begin{pmatrix} e^{-\beta\rho^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\Omega} & 0 & -\frac{1}{\Omega} \\ 0 & 0 & e^{-\beta\rho^2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\Omega} & 0 & -\frac{\rho^2}{\Omega} \end{pmatrix} \tag{7.32}$$

7.3.4 Component energètic del tensor d'impulsió energia

El component contravariant del tensor d'Einstein, G^{44} resulta, conservant la definició (7.4):

$$G^{44} = e^{-b\rho^2}\frac{-b\rho^4 + u^2f^2(\log(k\rho) - \frac{1}{4}) - u^2f^2(b\rho^2+1)\log^2(k\rho)}{\Omega^2}, \tag{7.33}$$

i el valor del corresponent component del tensor d'impulsió-energia:

$$T^{44} = c^4e^{-b\rho^2}\frac{-b\rho^4 + u^2f^2(\log(k\rho) - \frac{1}{4}) - u^2f^2(b\rho^2+1)\log^2(k\rho)}{8\pi G\Omega^2}, \tag{7.34}$$

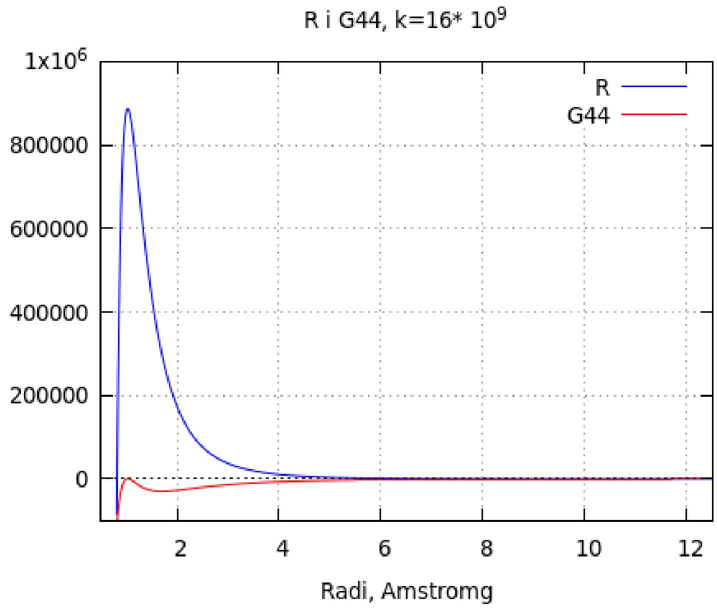

Figura 7.3: Curvatura i G^{44} en funció del radi.

7.3.5 Determinació dels paràmetres

Aquesta mètrica admet una curvatura positiva per a la major part de l'interval requerit de ρ, però amb una densitat energètica de referència negativa. En la figura (7.3) hem representat la curvatura i el valor del component G_{44} del tensor d'Einstein.

En la figura es mostra com la curvatura va disminuint fins a fer-se nul·la per al límit atribuït al valor pràcticament nul de la probabilitat dels orbitals. Pel costat de la proximitat al nucli, la curvatura també s'anul·la, però el model ja no és aplicable a distàncies molt properes al nucli.

Naturalment, aquest ajust es realitza mitjançant una elecció apropiada dels paràmetres.

7.3.6 Mètrica contravariant

És interessant, per a certes consideracions, tenir en compte la mètrica contravariant. Aquesta és:

$$g^{ij} = \begin{pmatrix} e^{-\beta\rho^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\Omega} & 0 & -\frac{1}{\Omega} \\ 0 & 0 & e^{-\beta\rho^2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\Omega} & 0 & -\frac{\rho^2}{\Omega} \end{pmatrix} \tag{7.35}$$

7.3.7 Avaluació de la mètrica 6

La mètrica:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} e^{\beta\rho^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 & 0 & -uf\log(k\rho) \\ 0 & 0 & e^{\beta\rho^2} & 0 \\ 0 & -uf\log(k\rho) & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.36}$$

compleix els requisits que hem establit per tal de considerar-la satisfactòriament descriptiva del moviment de l'electró en la teoria dBB dels àtoms hidrogenoides sense spin, a excepció del relatiu al contingut energètic referencial. Tanmateix, aquest requisit és només desitjable; no podem assegurar que, en una teoria desenvolupada totalment, no complesca una equació quàntica corresponent a l'equació de camp relativista.

Una característica notable d'aquesta mètrica és la possibilitat de fer-la tendir a condicions de Minkowski a partir d'un determinat radi límit que anomenarem ρ_L, per una convenient elecció del paràmetre.

7.4 Conclusió d'aquests tipus de mètriques

Aquestes mètriques 5 i 6 ens defineixen geometries lorentzianes que inclouen les geodèsiques dBB, amb contingut energètic positiu i curvatura també positiva. Per tant, compleixen plenament l'objectiu del nostre treball: mostrar que és possible definir varietats lorentzianes que incloguen geodèsiques corresponents a les trajectòries dels electrons en àtoms hidrogenoides segons la teoria dBB; que l'escalar de curvatura és positiu i que, en el cas de la mètrica 5, referida a l'equació de camp d'Einstein com a criteri heurístic referencial, té un contingut energètic positiu. Tanmateix, recordem un cop més que aquest darrer criteri és orientatiu.

La mètrica 5 és doncs totalment satisfactòria i la 6 en un grau menor, per bé que permet un ajust a condicions de Minkowski d'espai-temps pla a partir d'un valor definit del radi.

Capítol 8

Resum i conclusions finals

El propòsit de la present tesi és desenvolupar una hipòtesi: que el moviment de l'electró en un sistema atòmic hidrogenoide, tal com és descrit per la teoria de de Broglie-Bohm, en l'espai i temps pre-relativistes i sense consideració de l'espí, es pot formular en una geometria lorentziana. La hipòtesi física fonamental per a establir aquesta correspondència és que el moviment de l'electró descriu una geodèsica d'aquest espai-temps corbat, el que correspon al fet que el seu moviment no tinga acceleració i per tant no emeta energia. Entenem que aquesta hipòtesi de treball és coherent amb l'estabilitat de l'àtom. Així mateix, permet interpretar l'efecte del potencial quàntic característic de la teoria de de Broglie-Bohm en el marc de la curvatura de l'espai-temps de la varietat definida.

A partir d'aquestes hipòtesis i motivacions hem desenvolupat una primera part generalista, que ens ha conduït a les condicions matemàtiques que han de complir qualsevol mètrica que intente descriure les trajectòries dels electrons en els àtoms hidrogenoides segons la teoria de de Broglie-Bohm.

Els requisits teòrics mínims que hem considerat han estat els següents:

- Les geodèsiques corresponents al mateix nombre quàntic magnètic han de formar una congruència de circumferències, estant llur centre sobre un eix que passa pel protó nuclear.
- El moment cinètic total i la projecció d'aquest sobre l'eix OZ (L_z) de totes les possibles trajectòries de l'electró amb el mateix nombre quàntic magnètic (les circumferències abans esmentades) ha d'ésser comú i d'acord amb la Mecànica Quàntica.
- L'espai-temps lorentzià definit ha de ser comú per a tota la congruència de trajectòries, independentment del radi. En cas extrem, ha d'ésser

consistent únicament en l'àmbit diferencial.

- la curvatura de l'espai-temps definit ha d'ésser del mateix tipus en tot l'interval radial estudiat, preferiblement positiva, per la seua major estabilitat enfront a col·lisions elàstiques.

- La densitat de matèria-energia que correspondria a la Relativitat General és presa a nivell referencial, i ha d'ésser positiva. (Aquest requisit només en l'àmbit referencial)

Aquestes condicions les hem concretat en un teorema i tres corol·laris relatius a les mètriques lorentzianes susceptibles per a dilucidar si una mètrica determinada compleix les condicions perquè les seues geodèsiques siguen compatibles amb la teoria de DBB. Tanmateix, aquestes consideracions no són suficients per a definir l'esmentada mètrica a partir de la configuració el sistema quàntic. En conseqüència, ens hem hagut d'aproximar a la formulació d'aquests problemes per diferents suposicions apropiades.

En el primer model estudiat hem estudiat dues mètriques. (mètriques 1 i 2). La mètrica 1 ens ha mostrat una característica que hem considerat insuficient: que la mètrica depenga com a paràmetre d'un determinat radi i que, per tant, no permeta definir un espai-temps comú per a tota la congruència de trajectòries amb el moment magnètic. La segona "ansatz", mètrica 2, ha mostrat una coherència teòrica general, encara que és destacable el fet que la densitat energètica i la curvatura apareixen com a negatives.

Això ha evidenciat la necessitat de cercar models que funcionaren bé *per a sistemes macroscòpics sense lligams quàntics* en el marc de la Relativitat General i que, per un principi de continuïtat, semblant d'alguna manera al que ens permet passar de hamiltonians clàssics a quàntics, pogueren servir aproximadament per al nostre propòsit. El que hem desenvolupat en el segon model estudiat (mètriques 3 i 4), de pols en simetria cilíndrica, utilitzant la solució exacta de pols de Lanczos-Van Stockum . Aquesta mètrica genèrica no compleix exactament la condició geodèsica, encara que s'hi acosta molt. N'hem obtingut una mètrica amb curvatura i densitat energètica de referència molt grans (mètrica 3) i un altra que compleix tots els nostres requisits i que fins i tot permet un ajust sobre el contingut energètic del sistema (mètrica 4).Tanmateix, estem encara en situació de mètriques que no inclouen exactament les geodèsiques de la teoria dBB, encara que l'aproximació siga molt gran.

El tercer model estudiat (mètriques 5 i 6) ha permès els avantatges del primer i el segon. Tant la mètrica 5 com en la 6 admeten les geodèsiques dBB com a pròpies. La mètrica 5 posseeix curvatura positiva i contingut energètic de referència positiu, amb una remarcable constància. La mètrica 6 observa un ampli interval en què la curvatura és positiva, tot mantenint condicions de Minkowski a partir d'un radi límit. Tanmateix, el contingut energètic de referència és lleument negatiu. Aquesta qüestió podria ser irrellevant en el marc d'un model consistent d'equacions quàntiques de camp, per exemple de tipus Wheeler-DeWitt.

L'estudi de totes aquestes mètriques l'hem estès fins a la caracterització algèbrica i la classificació de Petrov, independent del sistema de coordenades utilitzat. **La classificació de Petrov de totes les mètriques estudiades és de tipus I.**

Hom pot doncs considerar que les mètriques 4, 5 i 6 poden descriure el moviment de l'electró en l'àtom hidrogenoide segons la teoria dBB com a geodèsiques d'una varietat lorentziana. En aquest espai-temps, el potencial, d'acord amb la teoria de de Broglie-Bohm, té una simetria cilíndrica, tot conjugant l'acció del potencial elèctric i el potencial quàntic. El potencial quàntic àdhuc amb el potencial elèctric de la teoria dBB tenen un efecte equivalent, en la nostra aproximació, a una curvatura de l'espai-temps i la seua funció en la teoria dBB és substituït en el nostre model, per la dita curvatura de l'espai-temps.

L'ona pilot, sempre segons la teoria esmentada, podría crear els efectes corresponents sobre el tensor mètric. L'afirmació que "Ψ és una mena de vibració de l'espai buit"[Holland, 1993] adquireix en la nostra aproximació una perspectiva matemàtica concreta.

La **conclusió final** és que és possible construir models que descriguen la dinàmica de la teoria dBB dels àtoms hidrogenoides en una varietat lorentziana i que, en fer-ho, justifiquen la hipòtesi bàsica d'assimilar les trajectòries orbitals dels electrons a una geodèsica de l'espai-temps definit. Aleshores, la *funció guia* de l'ona és equivalent a la curvatura de l'espai-temps definit. I, en la mesura que dita curvatura estiga definida per la presència d'energia-matèria, de manera *semblant* a allò que esdevé en la Relativitat General, suggereix una relació totalment dialèctica entre partícula i ona, en el sentit d'una interacció mútua ona-partícules que formen el sistema quàntic. En aquest sentit, el model proposat té connotacions diferents de la teoria dBB d'ona guia, on és l'ona la que guia la partícula, sense interacció en sentit contrari.

La limitació dels nostres resultats rau en el caràcter heurístic general del model. La superació d'aquest caràcter requeriria la consideració de teories plenament relativistes, com ara la teoria de Dirac, que està més enllà del propòsit d'aquest treball. D'altra part, la manca de la consideració quantitativa d'una equació quàntica equivalent a l'equació de camp d'Einstein (tot i que sembla que el plantejament dBB en l'equació de Wheeler-DeWitt pot utilitzar-se al respecte en futures aproximacions) i d'altres elements amb què poder completar la condició de les geodèsiques dBB impossibilita una determinació deductiva de la mètrica lorentziana, motiu pel qual ens hem hagut de limitar a fer "ansätze", suposicions fonamentades per a establir mètriques que després hem contrastat amb les condicions requerides.

Com a resum general podem afirmar que hem formulat les condicions necessàries perquè la mètrica d'una geometria lorentziana puga descriure, en una primera aproximació, el moviment de l'electró en l'àtom hidrogenoide com a una geodèsica. I que hem estudiat diverses mètriques que són capaces, amb divers grau d'aproximació, de descriure'l efectivament.

Queda per cercar una estructura matemàtica capaç de determinar unívocament la mètrica de la geometria lorentziana a través de les característiques del sistema quàntic que constitueix l'àtom hidrogenoide.

Continuant aquesta línia d'investigació creiem possible establir una teoria sòlida, més enllà d'un model heurístic. Aquesta hipotètica futura teoria s'haurà de contrastar amb la realitat experimental, mitjançant mètodes d'assaig i elaboració de dades que caldrà definir.

Capítol 9

Annex. Unes reflexions sobre l'epistemologia de la Física

9.1 Llibertat de creació conceptual en Física

Tot i el caràcter heurístic del treball que presentem, volem comentar alguns aspectes que justifiquen la seua intencionalitat. La Matemàtica és la llengua en què està escrita la Natura, com establí Galileu en el segle XVII en "Il saggiatore":

> *"Signor Sarsi, la cosa non istà così. La filosofia è scritta in questo grandissimo libro che continuamente ci sta aperto innanzi a gli occhi (io dico l'universo), ma non si può intendere se prima non s'impara a intender la lingua, e conoscer i caratteri, ne' quali è scritto. Egli è scritto in lingua matematica, e i caratteri son triangoli, cerchi, ed altre figure geometriche, senza i quali mezi è impossibile a intenderne umanamente parola; senza questi è un aggirarsi vanamente per un oscuro laberinto"*
> Galileu Galilei, 1623 *Il Saggiatore.*

La descripció rigorosa en la Física és impossible sense la Matemàtica. Cap aleshores la qüestió de per què la Matemàtica, estructura lògica creada per l'home, li permet la comprensió de la Natura.

Aquesta qüestió rep diverses respostes des de les diverses posicions epistemològiques, fruit de les corresponents concepcions filosòfiques. Des del punt de vista idealista s'ha defensat la idea, errònia al nostre entendre, que les formes matemàtiques eren la perfecta realitat i que la realitat experimental era la seua ombra. I des de posicions positivistes o empiristes s'ha volgut,

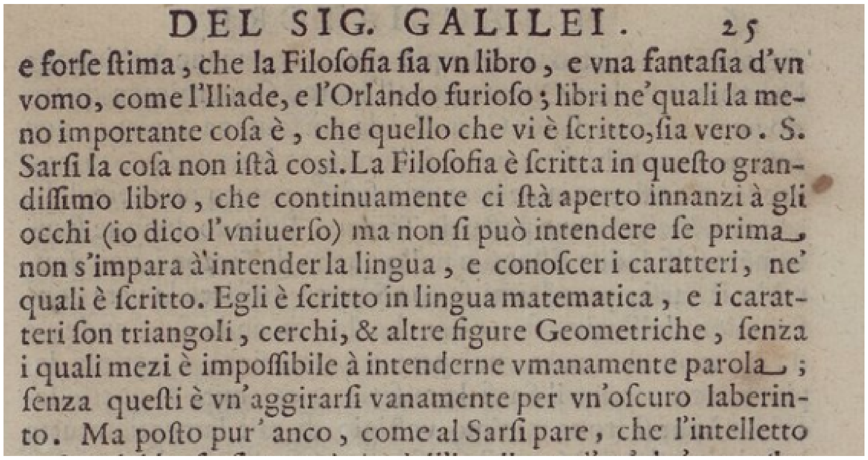
DEL SIG. GALILEI. 25
e forſe ſtima, che la Filoſofia ſia vn libro, e vna fantaſia d'vn vomo, come l'Iliade, e l'Orlando furioſo; libri ne'quali la meno importante coſa è, che quello che vi è ſcritto, ſia vero. S. Sarſi la coſa non iſtà così. La Filoſofia è ſcritta in queſto grandiſſimo libro, che continuamente ci ſtà aperto innanzi à gli occhi (io dico l'vniuerſo) ma non ſi può intendere ſe prima non s'impara à intender la lingua, e conoſcer i caratteri, ne' quali è ſcritto. Egli è ſcritto in lingua matematica, e i caratteri ſon triangoli, cerchi, & altre figure Geometriche, ſenza i quali mezi è impoſſibile à intenderne vmanamente parola; ſenza queſti è vn'aggirarſi vanamente per vn'oſcuro laberinto. Ma poſto pur' anco, come al Sarſi pare, che l'intelletto

Figura 9.1: Ïl Saggiatore", Galileu Galilei.

de manera no menys errònia a parer nostre, limitar la funció descriptiva de la matemàtica a l'ordenació de les "percepcions"experimentals, tot negant el seu caràcter explicatiu i universalista.

La Física, per la seua pròpia definició històrica com a "filosofia natural", sempre s'ha ocupat de descriure matemàticament la Natura. Està basada en conceptes bàsics elevats des de l'accepció quotidiana a través d'una acurada descripció, a categories fonamentals. Així ocorre amb els conceptes d'espai, temps, massa, energia, força i altres. Les lleis de la Física es formulen mitjançant lligams entre les categories per a descriure els sistemes físics. Fins i tot les categories estan subjectes a evolució, com és particularment evident en categories "modernesçom ara l'energia, la força o el camp i el seu lligam mitjançant equacions són el subjecte immediat de les diverses teories.

L'estructura lògica de la Física consisteix en uns axiomes bàsics, característics de cada part de la Física, dels quals deriven les diverses "lleis"que poden ser contrastades amb la realitat experimental dels diversos camps. Tal estructura la trobem en la Mecànica, l'Electromagnetisme, la Mecànica Quàntica – tan l'"ortodoxaçom la de de Broglie-Bohm– i la Relativitat. La Física parteix doncs dels fets experimentals que justifiquen els seus axiomes i torna als fets experimentals que han de ser coherents amb les seues lleis. Hi ha una relació dialèctica d'interdependència entre la teoria i la realitat experimental.

En conseqüència, la Física té un caràcter intrínsecament explicatiu, en tant que deductiu. És a dir, el seu caràcter explicatiu no deriva de cap aspiració "metafísica", ans de l'estructura lògica d'una axiomàtica, la més reduïda possible, de la qual deriva lògicament tot el conjunt de lleis.

Freqüentment, el treball científic consisteix a desenvolupar teoria o experimentació a partir d'aquesta estructura: és a dir, sense alterar, ans expandint el seu univers teòric i experimental. **Però també és un treball científic qüestionar-se aquest univers**; canviar o expandir de manera radical conceptes i lleis, tot descobrint nous plantejaments teòrics. És un salt de la quantitat a la qualitat, propiciat per una actitud especulativa i crítica. Aquesta lliure creació de conceptes ha fet possible el desenvolupament de la Física, quan les hipòtesis han mostrat ser coherents amb la realitat experimental. Quan Einstein arriba a la concepció que un observador que cau lliurement en realitat està recorrent una geodèsica d'un espai que no és euclidià, és a dir, que depèn de la curvatura de l'espai-temps, no hi arriba com a inducció d'una sèrie d'experiències, ans amb un moviment de creació intel·lectual que li porta a eixamplar el concepte d'espai-temps a la possibilitat d'una "deformacióï, doncs, obrint la porta a la Relativitat General i al necessari càlcul tensorial que hom havia desenvolupat prèviament.

Així ocorre amb els conceptes individuals transposats de la Física Clàssica a la Mecànica Quàntica de de Broglie-Bohm, com ara el concepte de trajectòria. Dit concepte està plenament definit i contrastat experimentalment en la Mecànica Clàssica; de fet en constitueix un objectiu genèric. En la interpretació de la Mecànica Quàntica de Copenhaguen se li extrau tota validesa al concepte perquè entra en contradicció amb el principi d'incertesa de variables conjugades. Però el concepte de trajectòria pot retindre un caràcter explicatiu, malgrat que no es puga identificar amb el concepte clàssic de trajectòria. I aquesta hipòtesi pot ser útil en l'elaboració d'una formulació matemàtica: Quan aquesta puga conduir a una verificació experimental, haurà entrat en el camp de la teoria física.

Contràriament a allò que propugnen certes visions positivistes, entenem que en Física és possible elaborar nous conceptes i hipòtesis teòriques amb total llibertat a partir dels conceptes preexistents. Així, a partir del concepte espai i el concepte intensitat puntual de magnitud, podem expressar el concepte de camp; a partir dels conceptes d'ona i partícula podem formular el concepte combinat d'ona-partícula. La validesa dels conceptes definits i de les hipòtesis que els inclouen vindrà condicionada, en Física, per la seua verificació experimental. De fet, la creació teòrica ha estat sempre un fruitós camí d'avanç científic. Caldria citar ací a Einstein, quan, en el seu celebèrrim "El significat de la Relativitat"es distancia tant de l'Apriorisme idealista com del Positivisme:

"Admetent que l'univers d'idees no pot ser deduït de l'experiència per un mètode lògic ans que, per contra, és una creació de la ment humana, sense la qual no és possible la Ciència, així i tot resulta que aquest univers d'idees és tant dependent de la natura de les nostres experiències com la forma dels vestits que utilitzem és dependent de la forma dels nostres cossos."

Malgrat que, com és sabut, Einstein va tindre concepcions positivistes inicialment per influència sobretot de Mach ([Holton, 1982], pag. 182)).

9.2 Perspectiva dialèctica de la Física

El realisme essencial i, si es vol, trivial, està constituït per la constatació que el món existeix amb independència de la nostra consciència; i que nosaltres mateixos formem part d'aquest món. Conjuntament hi ha el principi de comprensibilitat del món que ens indica que som capaços de construir esquemes comprensius del món, en particular de l'univers físic, mitjançant els conceptes fonamentals (categories) i lleis, verificables experimentalment.

Més enllà d'aquests dos principis bàsics, comuns a les posicions realistes i materialistes de comprensió de l'Univers, hi ha diverses consideracions bàsiques, que ens condueixen al terreny de la Dialèctica.

Com hem expressat abans, els conceptes amb què descrivim el món físic no tenen un caràcter definitiu, immutable. Categories que creiem immutables en la Física del passat, com espai i temps, esdevenen superades i substituïdes per l'espai-temps relativista; d'altres noves, com el fibrat de l'espai-temps, semblen afermar-se en la descripció física. Espai i temps són, al contrari del que hom presenta freqüentment, conceptes oposats, com ho demostren tot portant signe contrari en la mètrica relativista i en l'expressió de l'interval elemental. Quelcom semblant esdevé amb les categories de partícula i ona, oposats que s'integren en la nova categoria d'ona-partícula. Ens trobem així davant de la Dialèctica del coneixement científic.

D'altra banda, els mateixos objectes del coneixement es transformen de manera intrínseca, independentment de les nostres accions, en el **moviment universal de la matèria i energia**. Segons la famosa dita d'Heràclit, hom no pot banyar-se dues vegades en el mateix riu. Això fa que intentem formular les categories de la coneixença de manera dinàmica, és a dir, que incloguen el temps. Com deia Engels, una planta no sols és el vegetal que habitualment se'ns presenta en la ment com a tal, ans la llavor, la irrupció, la creixença, la floració i de nou la llavor i finalment la mort. De fet, tot objecte està definit per una sèrie de característiques que el limiten i, en la mesura que evoluciona i supera aquests límits, es "nega". Tot objecte limitat, doncs, posseeix en si mateix la seua negació: la transformació de la potencialitat en canvi real. Així esdevé amb el fotó que desapareix absorbit per un sistema quàntic.

Les lleis científiques no són extrínseques a la realitat, ans formen part de la seua estructura. No tenen una existència fora de la realitat.

Per finalitzar aquestes constatacions, ens referirem al caràcter fonamental en la nostra concepció de la categoria de totalitat, quant que es constata una interacció general entre tots els processos en l'Univers. Notem que, en plantejaments conjunts Wheeler-DeWitt i dBB hom inclou tot l'Univers, alhora que hi ha l'aplicació a la partícula elemental.

Per tant, proposem una perspectiva dialèctica per a comprendre la Física, en particular l'àmbit de la Física que ens ocupa. La visió de la Dialèctica que proposem és completament diferent de la de l'idealisme de Hegel i coincideix, en línies generals, amb el Materialisme Dialèctic. Aquest inclou el Materialisme Històric de Marx, l'objecte d'aquest essent la Història Universal, en què es desenvolupa el conflicte entre les classes socials, mentre que en el tractament dialèctic de la natura, l'objecte és el Cosmos, o parts d'ell; i quan s'inclou el subjecte humà, per exemple l'experimentador, és com a part d'aquest entorn natural ([Engels, 1979]). D'altra part, la Física com a desenvolupament històric es pot considerar, com qualsevol altra activitat humana, des del punt de vista del Materialisme Històric en tant que els corrents de pensament científic estan fortament influenciats, com no podia ser altrament, per la dinàmica històrica. (Tal podia haver esdevingut, per exemple, en la gènesi de la Mecànica Quàntica).

Totes les dialèctiques tenen en comú el caràcter crític – "negatiu-- envers la concepció establida. En Hegel, estem en un context idealista, un sistema ontològic en què el desenvolupament del pensament determina, per així dir, el moviment de la Història. Dit pensament està basat en els conceptes bàsics preexistents en aquella època; la pretensió de Hegel era explicar el moviment de l'ésser i en particular de la Història a partir d'aquelles categories. La racionalitat metafísica determinava el moviment real, en particular la Història humana. Al darrera hi havia la confrontació del món final del feudalisme, com a realitat immediata, i la contrapartida racionalista burgesa, inspirada en la Revolució Francesa del 1789.

La Dialèctica de Marx és materialista, no idealista; ací l'objecte, la "categoria de totalitat"no és un ésser metafísic encara que racional ans directament l'ésser social, històric, en evolució sota els conflictes entre les classes.

Marx cerca les categories que expliquen el moviment real, en aquest cas social i històric, allà on aquestes evidencien moviment. Els conflictes que determinen el moviment són les fonts en què cerca els seus conceptes fonamentals i les lleis explicatives. El pensament perd en Marx la pretensió hegeliana de substituir la realitat, que seria un reflex imperfecte dels conceptes, ans és la realitat mateixa, del fet històric en aquest cas, qui, a través de l'anàlisi de les forces en conflicte que hi actuen, determinen el moviment històric.

Engels (Engels [1979]) s'esforçà a traslladar la Dialèctica Materialista al món de les ciències naturals i hi va fer les primeres aportacions sòlides. És aquesta concepció dialèctica que cal desenvolupar per a aconseguir una perspectiva dialèctica de la Natura que siga coherent i guia de la interpretació física.

Arribats a aquest punt, cal distingir entre la dialèctica dels objectes físics i la dialèctica de les concepcions humanes, per suposat inextricablement lligades: la dialèctica objectiva i subjectiva.

En la dialèctica dels objectes físics, és fonamental la interacció entre la matèria-energia a través de tot l'univers i llur constant transformació. En l'extrem oposat, hi ha la individualitat de la partícula aïllada (en rigor, però no existeixen els sistemes tancats) i, els agregats de moltes partícules permeten definir sistemes mesoscòpics, que són els que observem quotidianament en la Física de les dimensions mitjanes.

En la Física de les dimensions mitjanes observem l'oposició de contraris característica de la concepció dialèctica; oposició que crea una tensió que produeix l'evolució dels sistemes particulars. Molt sovint aquesta oposició la podem caracteritzar en una equació d'evolució, pels potencials i energies posades en joc. Per exemple, en l'equació de Hamilton-Jacobi tenim la variació temporal de l'acció que es troba lligada a la de l'energia cinètica i l'energia potencial. És a dir, els objectes físics posseeixen una dinàmica pròpia, independent de l'observador (que naturalment pertany igualment al món de la realitat física), determinada per "forces"oposades.

La dialèctica de la partícula elemental es caracteritza per una interacció entre la partícula i l'ona que la guia a través de l'espai temps, co-determinada per aquella. En un sistema quàntic més complex, la funció d'ona comuna a tot el sistema (impossible de separar en el producte de llurs components, quan es tracta d'un sistema en interacció) és qui guia les partícules i codeterminant-se amb aquelles. La funció d'ona representa el sistema total en la dinàmica de les partícules.

Però al costat d'aquesta dialèctica dels objectes físics, existeix la dialèctica de la coneixença per l'observador. La dialèctica és un pensament negatiu (Marcuse [1970]); front allò que les coses són per a l'observador, en un moment donat, està allò al que "són"en un sentit diferent, de vegades només present com a potencialitat; la tensió entre ambdues condiciona l'evolució del procés cognitiu.

Aquesta negativitat en la percepció dels objectes ja es manifestà en la Dialèctica de Hegel, contraposant la realitat del món feudal tardà i la racionalitat de la revolució francesa. I aquest caràcter **negatiu** és el que va ser negat al seu cop pel pensament **positiu** que sorgeix com a reacció, de la mà sobretot de A. Comte.

Traslladat al camp de la Física, les concepcions físiques sobre la realitat se'ns manifesten com la representació de la realitat que la teoria estableix. La negativitat es tradueix en un esperit de crítica constant per a transcendir aquesta representació i passar a una altra, que serà novament objecte de crítica. És aquest moviment el que hom ha anomenat dinàmica de tesi, antítesi i síntesi.

Aplicat aquest esquema a l'entitat partícula i ona, ens trobem en la situació que en la Física existeixen dues representacions per la mateixa entitat física. Tant a la tesi "onaçom "partículaçorrespon una antítesi que mostra la seua incompletitud com a descriptor de l'entitat. Aleshores la "síntesi"és el concepte d'"ona-partícula": la partícula en el si d'un sistema, representat per l'ona; que al seu cop, es troba codeterminant-se amb la partícula. Que aquest concepte combinat és suficient per a constituir una nova "tesiçonsistent, queda reflectit en la teoria de l'ona guia de de Broglie-Bohm. **El concepte fonamental o "categoria"partícula-ona substitueix així als dos conceptes anteriors "partículaï "ona", de manera semblant a com el concepte d'espai-temps substitueix als antics d'"espaiï "temps"de la Física clàssica.**

Veiem doncs que ens trobem amb dos moviments diferents, que són sovint barrejats: un és la dialèctica pròpia dels objectes, sotmesos al continu canvi, determinat per la dinàmica pròpia, pel seu entorn i per l'Univers total i l'altre és el continu qüestionament de les nostres coneixences, que condueixen a la dinàmica crítica que volem que caracteritze la Física.

Quan, en un tema concret, la dialèctica de l'objecte és captada i traduïda en una síntesi que és coherent amb la realitat experimental, assistim a un moment exitós del desenvolupament de la Física.

9.3 El Positivisme i la Mecànica Quàntica

La derivació de l'actitud de molts científics vers postulats positivistes i anti deterministes s'ha de considerar com a un corrent filosòfic de fons que va actuar i actua sobre l'evolució de la Física i, molt particularment, durant la formulació de la Mecànica Quàntica. Per això, sembla convenient emmarcar-la en el seu context històric, tot remuntant-nos a temps prou anteriors a l'aparició de la Mecànica Quàntica.

Cap a finals del segle XVIII es produeix a Europa un gran canvi sociopolític, emmarcat especialment en la Revolució Francesa esdevinguda el 1789. El seu exponent filosòfic consistí en l'anomenada **"filosofia negativa"**, això és, el pensament dirigit a la crítica del món existent fins llavors, contraposant-lo a l'ideal de la racionalitat que suposadament era l'ideal de la dita revolució. Això es materialitzà en certs filòsofs entre els quals és un notable exponent Hegel. Per a ell, tota cosa podia ser contemplada de dues maneres: com a allò que era en el discurs "oficialï com allò que era, o podia ser, en un marc racional. A més, tota cosa es podia considerar en evolució, des d'allò que era fins a la negació d'aquesta essència. Tota cosa conté, doncs, la seua pròpia negació, contra la qual s'aferma en la mesura que "és". Aquest tipus de plantejaments eren extraordinàriament corrosius per a l'ordre filosòfic, científic i, naturalment, polític. D'ací el nom de "filosofia negativa".

El positivisme va constituir una reacció contra el racionalisme i la "filosofia negativa", crítica amb allò existent: les formes que descrivien el món previ a la Revolució del 1789, contraposades a una racionalitat que la nova època anunciava. Dita filosofia crítica estava representada, per exemple, per Descartes, la Il·lustració i Hegel. El determinisme estava representat entre d'altres per Laplace i era una expressió d'aquesta racionalitat, que inspirava també a una classe social que contemplava amb optimisme el món post revolucionari, la burgesia.

Enfront de la "filosofia negativa"s'aixecà una filosofia que negava tota crítica exterior a allò que és oficialment existent. Això és el que s'amaga de facto al darrere de l'adhesió als "fetsï la negació dels conceptes "universals". L'occità A. Comte (Comte [1982]) va ser l'iniciador d'aquest corrent, del qual hi ha diverses tendències.

Tal adhesió als fets immediats va tenir per a la Ciència i en particular per a la Física l'avantatge inicial d'esvair algunes il·lusions metafísiques medievals. Tanmateix, l'afirmació que la filosofia havia de produir en l'individu l'acceptació "positiva"de l'ordre existent, com volien Comte i Stahl, tenia una implicació profundament negativa per al desenvolupament de nous conceptes en Física, que criticaren els conceptes i les lleis físiques existents.

En certes condicions històriques, doncs, el positivisme esdevingué la punta de llança contra allò que havia estat el paradigma de la Física Clàssica des dels seus inicis: el determinisme. En correspondència amb una època en què les classes socials dirigents a Europa enfrontaven amb optimisme la perspectiva d'un món pròsper, que evolucionava des de la foscúria medieval fins a la modernitat d'un progrés indefinit, el determinisme gaudia de l'aprovació de gran part del món acadèmic.

Tanmateix, cap a mitjans del segle XIX començaren a manifestar-se tendències politicosocials que qüestionaven la solidesa del model de societat establert. Com a reacció a aquestes tendències es manifestà en part de la comunitat científica europea un retorn a posicions obstruccionistes, si no obscurantistes (Pannekoek [1976], pàg. 73). Esmentem en aquest sentit l'anti-atomisme de finals de segle a què tant es va enfrontar L. Boltzmann (Boltzmann [1986]). És notable l'oposició d'influents científics com Mach a l'existència d'àtoms i molècules perquè no eren susceptibles d'observació directa.

Aquestes tendències es refermaren a partir de la segona dècada del segle XX. Recordem la revolució russa al 1917 i el període revolucionari *alemany* entre 1918 i 1923. Una repercussió d'aquests esdeveniments podria haver anat aparellada amb un corrent de rebuig als plantejaments deterministes-materialistes i la recerca de nous paradigmes més "innovadorament conservadors", al voltant de filosofies de tipus positivista.

El positivisme parteix de les sensacions del "món externï vol transformar-les en descripcions empíriques de la Natura. Tanmateix, ignora que els conceptes de què parteix per a referir les seues teories, tals com matèria, energia, espai, temps, partícula, ona, etc. són ja una creació humana. En cap cas són objectes primaris de la percepció. Acceptar els conceptes existents i pretendre'ls definitius és un greu error que almenys a la Física, condueix a l'immobilisme, quan no al condicionament inquisitorial sobre què no cal estudiar o experimentar.

Al nostre entendre, **la filosofia de la Física Teòrica s'hauria de basar en la lliure creació de conceptes i teories, que expliquen millor la realitat i que inspiren experiments que validen aquestes teories . Tota hipòtesi mínimament coherent és plausible, al preu de rebutjar-se o afermar-se com a resultat de la seua validació experimental**.

9.4 Sobre la relació entre la teoria ona-pilot i la interpretació dita ortodoxa o de Copenhaguen

D'una banda, la teoria quàntica ortodoxa (ens limitarem a la seua extensió no relativista en aquesta nota) sembla tenir un caràcter exclusivament estadístic. El seu desenvolupament a partir dels seus postulats és altament rigorós (Messiah [1968], Galindo and Pascual [1989]) i és molt apta per a resoldre els problemes habituals dels sistemes quàntics formats per un nombre elevat de partícules, especialment en la forma de mecànica ondulatòria de Schrödinger.

Els postulats de la Mecànica Quàntica ortodoxa no parteixen ni permeten arribar a l'ona-partícula individual. S'hi introdueix el concepte d'**estat**, que té un caràcter global per a qualsevol ona-partícula que complisca una determinada sèrie de condicions. En l'experiència de la doble escletxa, totes les partícules incidents pertanyen al mateix estat i tanmateix el comportament de cadascuna és, en general diferent, com ho evidencia la realització de l'experiment partícula a partícula. Per tant, el concepte d'estat no és suficient per a descriure la partícula *individual*; adoptar la posició contrària comporta no poder **explicar** l'experiment de la doble escletxa (en termes referibles a la nostra conceptualització de l'espai-temps).

La Mecànica Quàntica, a parer nostre, hauria d'incloure com a **categoria** o concepte bàsic el d'ona-partícula.

Quant al postulat de l'equació de Schrödinger cal dir que, des del nostre punt de vista, no es pot considerar com a tal postulat ans com un teorema que relaciona la funció d'ona i l'estructura del sistema quàntic, descrit pel Hamiltonià del sistema clàssic equivalent. Hem recordat al llarg del present treball la gènesi de dita equació, partint dels treballs de de Broglie. El concepte de potencial quàntic hi és implícit.

D'altra banda, la teoria de de Broglie-Bohm s'estén també als sistemes individuals; parteix de la dualitat ona-partícula, defineix el potencial quàntic i permet l'estudi del comportament dels sistemes quàntics en el marc de l'espai-temps. Permet replicar tots els resultats de la Mecànica Quàntica ortodoxa.

Seria doncs concebible una reformulació de la Mecànica Quàntica ortodoxa no relativista de manera que tingués com a postulat la relació ona-corpuscle, la qual cosa possibilitaria una expressió dels seus resultats en l'esquema espai-temporal. Aquesta reformulació permetria a més estudiar els fenòmens individuals tot incloent-hi la teoria dBB.

Tanmateix, la teoria dBB és també, des del nostre punt de vista, modificable, quant que no considera en peu d'igualtat l'ona i la partícula. L'ona guia la partícula, però la partícula no incideix en l'ona (teoria de l'ona -guia). S'hi perd doncs el caràcter dialèctic de la seua interacció. D'altra banda, es limita a un espai i temps clàssic, fent així impossible qualsevol consideració sobre espais-temps corbats, en particular sobre geometries lorentzianes, comuns amb la Relativitat General. Nosaltres hem tractat de donar-li aquest caire dialèctic a l'ona i a la partícula en aquest treball.

Capítol 10

Bibliografia

Bibliografia

A Aspect. Proposed experiment to test the non separability of quantum mechanics. Phys. Rev., D14:1944–51, 1976.

J.S. Bell. On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox. Physics, 1(3):195–200, 1964.

J.S. Bell. On the problem of hidden variables in quantum theory. Rev. Mod. Phys., (38):447–452, 1966.

D. Bohm. A suggested interpretation of the quantum theory in terms of 'hidden' variables.I. Physical Review, 85(2):166–179, 1951a.

D. Bohm. A suggested interpretation of the quantum theory in terms of 'hidden' variables.II. Physical Review, 85(2):180–193, 1951b.

L. Boltzmann. Escritos de mecánica y termodinámica. Alianza Editorial, S.A., Madrid, 1986.

A. Comte. Discurs sobre l'esperit positiu. Laia, Barcelona, 1982.

L. de Broglie. Recherches sur la théorie des quanta. Annales de Physique, III(Serie 10), 1925.

L. de Broglie. Le dualisme des ondes et des corpuscules dans l'oeuvre d'Albert Einstein. Academie des Sciences, Institut de France, Séance annuelle: 17, 1955.

L. de Broglie. Interpretation of quantum mechanics by the double solution theory. Fondation Louis de Broglie, 12(4, pages =), 1987.

D. Dürr and W. Struyve. Quantum Einstein equations. arXiv:2003.03839v2[gr-qc]10 Aug 2020, 2020.

Goldstein S. Zanghi N Dürr, D. Quantum equilibrium and the origin of absolute uncertainty. J.Stat.Phys., 67:843–907, 1992.

Goldstein S. Zanghi N Dürr, D. Hipersurface Bohm-Dyrac models. Phys. Review, A(60):2729–2736, 1999.

A. Einstein. Conceptions scientifiques morales et sociales. Flammarion, Paris, 1952.

A. Einstein. El significado de la relatividad. Espasa-Calpe, S.A., p. 152, 1984.

F. Engels. Dialéctica de la Naturaleza. Editorial Critica, S.A. (Grupo editorial Grijalbo), Barcelona, 1979.

Gómez G. and A. Oliva. Mecànica quàntica causal. Revista de Física, (11): 16, 1996.

A. Galindo and P. Pascual. Mecánica Cuántica. EUDEMA, S.A., Madrid, 1989.

Fullana Alonso M.J. Kotsireas I. Gkigkitzis I.and Haranas I. Gómez Blanch, G. Space time geometry in the atomic hydrogenoid system. approach to a dust relativistic model from causal quantum mechanics. R. Mex. F., 2018 (64):18–29, 2018.

G. Gómez Blanch and M.J. Fullana Alonso. On geometrodynamics in atomic stationary states. R. Mex. F., 2019(65):148–158, 2019.

H. Goldstein. Mecánica Clasica. Aguilar, S.A. de ediciones, Madrid, 1970.

Kotsireas I. Gómez G. Fullana M.J Gkigkitzis I. Haranas, I. Yukawa effects on the mean motion of an orbiting body. Astrophys Space Sci, page 361:365, 2016.

P.R. Holland. The Quantum Theory of motion. Cambridge University Press, p. 67, 1993.

G. Holton. Ensayos sobre el pensamiento científico en la época de Einstein. Alianza Editorial, S.A., Madrid, 1982.

H. MacCallung M. Herlt E. Kramer, D. Stephani. Exact solutions of Einstein's field equations. Cambridge University Press, p. 222, 1980.

K. Lanczos. Über eine stationäre kosmologie im sinne der einsteinschen gravitationstheorie. Zeitschrift für Physik., 21(1):73–110, 1924.

D. Licata, I.i Fiscaletti. Quantum Potential:Physics, Geometry and Algebra. Springer, Palermo, 2014.

A. Lichnerowicz. Elementos de cálculo tensorial. Aguilar, S.A.- Espasa-Calpe, S.A., p. 121, 1968.

H. Marcuse. Razón y Revolución. Alianza Editorial, 1970.

A. Messiah. Mecánica Cuántica. Editorial Tecnos, S.A., Madrid, 1968.

M. Novello, J.M. Salim, and F.T. Falciano. On a geometrical description of quantum mechanics. Int J. Geom. Mth.Mod.Phi., 8(1):87–98, 2011.

A. Pannekoek. Lenin filósofo. Zero, S.A., Bilbao, 1976.

C. Philippidis, C. Dewdney and B Hiley. Quantum interference and the quantum potential. Il Nuovo Cimento B, 52:15–28, 1979.

E. Schrödinger. Quantisierung als eigenwertprobleme, II Mitteilung. Annalen der Physik, IV, Folge. 79:489–527, 1926a.

E. Schrödinger. Quantisierung als eigenwetprobleme, IV Mitteilung. Annalen der Physik, IV, 81:109–139, 1926b.

A. Shojai and F. Shojai. Understandig quantum theory in terms of geometry. arXiv:gr-qc/0404102 v1, 1(1):1–99, 2004a.

A. Shojai and F. Shojai. Constraint algebra and equations of motion in the Bohmian interpretation of quantum gravity. Pramana 58, pages 13–19, 2004b.

A. Shojai and F. Shojai. About some problems raised by the relativistic form of de Broglie-Bohm theory of pilot wave. Int J b, 1(1):87–98, 2011.

F. Shojai and M. Golshani. On the general covariance in Bohmian quantum gravity. Int.J.Mod. Phhys.A13,2135-2144 and arXiv:gr-qc/9903047, pages 1–17, 1998.

S. Simons. Análisis vectorial. Alhambra, Madrid, 1968.

R. Tumulka. The unromantic pictures of quantum theory. J. Physics, A (40):3245–3273, 2006.

W. van Stockum. The gravitational field of a distribution of particles rotating around an axis of symmetry. Proc. Roy. Soc. Edinburgh, A(57):135, 1937.

J. von Neumann. Mathematical foundations of Quantum Mechanics. Princenton Universiy Press, Princenton, 1955.