

Espectros R de átomos y moléculas.

por

M. W. Evans,

Civil List

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

y

H. Eckardt,

AIAS / UPITEC

(www.aias.us, www.et3m.net, www.upitec.org)

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net)

Resumen

Se desarrolla el concepto de espectros R de átomos y moléculas para dar perfiles espectrales en ejemplos individuales. El concepto se basa en la teoría de absorción con conservación del momento lineal considerado correctamente por primera vez. Estas consideraciones extienden la ecuación de energía de Einstein y el concepto de energía en reposo a la relatividad general; el concepto de masa en reposo de la relatividad restringida deviene la masa covariante de la relatividad general, definida en términos del factor R , con unidades de la inversa de metros cuadrados. Cada transición atómica o molecular posee su propio espectro o patrón R .

Palabras clave: Teoría ECE, teoría R , espectros R de átomos y moléculas.

1. Introducción.

En trabajos recientes incluidos en esta serie de 165 documentos a la fecha [1 – 10] se han evaluado correctamente las ecuaciones de Einstein de Broglie por primera vez utilizando métodos directos, y se ha descubierto que las mismas son internamente inconsistentes, al punto de volverse inutilizables en relatividad restringida. Este trabajo se describió en los documentos UFT 158 a 164 de esta serie, publicados en los portales de la teoría ECE [11]. Se ha evitado el desastre para la física moderna mediante el desarrollo del concepto de masa covariante en relatividad general, corregida mediante la teoría ECE. La masa covariante se define en términos del parámetro R de la ecuación de onda de la teoría ECE, un parámetro que se basa en el concepto de masa covariante. Aún cuando se introdujo R en el primer documento de esta serie, su significado profundo no resultó completamente claro hasta que se volvió evidente el fracaso de la vieja física, en documentos tales como UFT 158 y UFT 159. En estos documentos se encontró que la teoría de la dispersión Compton fracasaba completamente si se basaba en la teoría de la relatividad restringida, al observarse que las masas de las partículas elementales que interactuaban no eran constantes según la teoría de de Broglie Einstein aplicada correctamente. Por lo tanto, los fundamentos de la vieja física se derrumbaron, ya que este tema demostraba consistencia sólo en el marco de un contexto muy estrecho.

Se ha sabido, casi desde su publicación en 1915, que la teoría de la relatividad general, tal como fuera propuesta por Einstein y otros investigadores durante el siglo XX, posee errores fundamentales debido a varias razones, en especial el empleo de una asimetría incorrecta para la conexión geométrica. La teoría fracasó completamente con el descubrimiento de las galaxias en espiral, las cuales no puede describir en absoluto. Esto constituye otro desastre intelectual para la vieja física, el cual ha sido corregido mediante la teoría ECE a través del empleo de una geometría más completa, la cual incluye a la torsión junto con la curvatura. La teoría ECE es capaz de describir en forma directa [11] las bases de las galaxias en espiral sin el empleo de conceptos tales como la materia oscura ni la utilización de la no baconiana teoría de cuerdas. La vieja teoría general de Einstein se basaba en un desprecio completamente arbitrario de la torsión del espaciotiempo. Esta última existe en la geometría de Riemann y en todos los desarrollos a partir de la misma [12] tales como la geometría de Cartan o cualquier otra geometría válida. Se encontró, en documentos tales como el UFT 139 [11], que la acción del conmutador sobre cualquier tensor en cualquier geometría aísla la conexión geométrica. Esta última debe de tener, por lo tanto, la antisimetría del conmutador.

La crisis de la vieja física empeoró cuando se descubrió que la teoría de absorción no había considerado adecuadamente la conservación del momento lineal, y nuevamente se evitó el desastre a través del empleo de R , el cual produce nuevos tipos de espectros de empleo en análisis espectral. En la Sección 2 se desarrolla la teoría de los espectros R a partir del ángulo de dispersión definido para átomos y moléculas mediante la correcta consideración de la conservación del momento lineal. Estas consideraciones se extienden a la dispersión Raman en la Sección 2, mientras que en la Sección 3 se ofrecen algunos ejemplos de espectros R para el hidrógeno atómico y otros casos.

2. Espectro R en absorción atómica y molecular.

En el documento UFT 162 [11] se definió un ángulo de dispersión en el contexto de la absorción atómica mediante una correcta consideración de la conservación del momento:

$$\cos \theta = \frac{E_1 E_2 - E_0^2}{(E_1^2 - E_0^2)^{1/2} (E_2^2 - E_0^2)^{1/2}} \quad (1)$$

donde E_1 y E_2 son niveles de energía del átomo de H y donde E_0 se define mediante:

$$E_0 = \hbar c R^{1/2} \quad (2)$$

donde R se define a través de la ecuación de onda de la teoría ECE [11]:

$$(\square + R) q_\mu^\alpha = 0 \quad (3)$$

Aquí, \hbar y c son la constante reducida de Planck y la velocidad de la luz, respectivamente, y q_μ^α es la tétrada de Cartan. Para el electrón libre, la Ec. (2) se reduce a:

$$E_{00} = m_0 c^2 \quad (4)$$

donde m_0 es la masa del electrón libre, es decir su masa tal como viene expresada en las tablas de normas. El trabajo a partir del documento UFT 158 muestra que este concepto de masa resulta insuficiente, ya que la masa posee un significado más profundo y el concepto de R satisface este requerimiento. Cuando el electrón se encuentra dentro del átomo o molécula, y cada vez que interactúa con un fotón durante el proceso de absorción, se cumple la Ec. (2). El mismo concepto aplica en la dispersión Compton, cuando un rayo X o gamma choca de manera inelástica con un electrón en un átomo o molécula. El concepto de electrón libre es una idealización, ya que nunca puede observarse sin interacción. Este hecho cuestiona la definición actual para la masa m_0 . Por ejemplo, uno de los experimentos utilizados para determinar la masa del electrón en los laboratorios de normas se lleva a cabo mediante la medición de la constante de Rydberg, pero a partir de los descubrimientos incluidos a partir del documento UFT 158, resulta claro que la constante de Rydberg se ha interpretado sin una consideración correcta de la conservación del momento lineal. Se interpretó a partir de la ecuación de Schroedinger, la cual da:

$$R_{\text{Rydberg}} = m_0 e^4 / 8 h^2 \epsilon_0^2 \quad (5)$$

donde ϵ_0 es la permitividad del vacío utilizada en la ley de Coulomb de la ecuación de Schroedinger. Éste procedimiento se ajusta a los resultados experimentales, como es bien sabido, pero sólo en el marco de un contexto estrecho y en el límite no relativista de la mecánica cuántica. Se sabe ahora, a partir del documento UFT 158, que esta coincidencia es en un contexto estrecho. En un contexto más amplio la teoría fracasa completamente. Si una teoría fracasa en un contexto, la misma debe descartarse o desarrollarse. Esto constituye una regla fundamental de la filosofía natural

Sabemos ahora que la energía en reposo E_0 es una función de R , y en general tanto E_0 como R varían, al ser característicos para la situación considerada - en esta sección, la absorción y la dispersión Raman. Se llega a esta conclusión mediante una sencilla pero correcta consideración de la conservación del momento lineal. En la vieja teoría atómica esto se llevaba a cabo mediante una aproximación grosera a través del empleo del número cuántico 1, tal como se demuestra en el documento UFT 162[11].

Resolviendo la Ec. (1) se obtienen los espectros R para la absorción atómica y molecular:

$$R = \frac{1}{2a\hbar^2 c^2} \left(-b \pm (b^2 - 4ac)^{1/2} \right) \quad (6)$$

donde:

$$\left. \begin{aligned} a &= 1 - \cos^2\theta, \\ b &= (E_1^2 + E_2^2) \cos^2\theta - 2 E_1 E_2 \\ c' &= E_1^2 E_2^2 (1 - \cos^2\theta). \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

En general existen dos soluciones: R_+ (b positivo) y R_- (b negativo). Los espectros de R pueden definirse como gráficas de R_\pm contra θ para valores dados de E_1 y E_2 . Estos son niveles de energía

que pueden medirse experimentalmente a partir de espectros atómicos o moleculares, tal como es bien conocido. Los niveles de energía E_1 y E_2 son estados confinados, de manera que tienen valores negativos. En aquellos casos en los que R adquiere un valor complejo adoptamos la regla habitual de la física de utilizar el producto conjugado para calcular un valor real como sigue:

$$R := (R R^*)^{1/2} \quad (8)$$

de manera que:

$$R_+(\theta) = (R_+ R_+^*)^{1/2} \quad (9)$$

$$R_-(\theta) = (R_- R_-^*)^{1/2} \quad (10)$$

Dado que por lo general θ resulta desconocido, se le varía en el intervalo:

$$0 \leq \theta \leq \pi \quad (11)$$

y se le incrementa para obtener representaciones gráficas de $R_+(\theta)$ y $R_-(\theta)$. Estas definen los espectros de R de absorción atómica y molecular y son de gran utilidad en análisis.

Análogamente, los espectros de R de la dispersión Raman pueden hallarse a partir de la Ec. (86) del documento UFT 162

$$R = \frac{1}{2a\hbar^2 c^2} \left(-b \pm (b^2 - 4ac')^{1/2} \right) \quad (12)$$

donde

$$\left. \begin{aligned} a &= 1 - \cos^2 \theta, \\ b &= (E_i^2 + E_f^2) \cos^2 \theta - 2A, \\ c' &= A^2 - E_i^2 E_f^2 \cos^2 \theta, \\ A &= E_i E_f - \hbar^2 \omega \omega' (1 - \cos \theta) . \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Esta ecuación se obtiene a partir de una ecuación inicial muy sencilla, y el método puede desarrollarse ampliamente para tipos más completos de teoría Raman. Aquí ω es la frecuencia angular incidente en la dispersión Raman, y ω' es la frecuencia angular de dispersión. En la Ec. (13), θ es el ángulo de dispersión utilizado en el espectrómetro. El nivel inicial de energía del electrón en el átomo o molécula es E_i en tanto que el nivel final de energía es E_f . En la Ec. (12) un fotón choca con un electrón en el nivel de energía E_i del átomo o molécula. La energía aumenta a E_f de un orbital de energía superior, y el fotón pierde energía hasta $\hbar\omega'$. El fotón se dispersa a partir de la molécula con esta energía. La dispersión Raman depende del momento dipolar eléctrico inducido:

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E} \quad (14)$$

donde \mathbf{E} es la fuerza de campo eléctrico del campo electromagnético entrante y donde $\boldsymbol{\alpha}$ es en general un tensor de polarizabilidad anisotrópica. En la teoría clásica más sencilla y bien conocida:

$$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}_0 + \Delta \boldsymbol{\alpha} \cos \omega' t \quad (15)$$

donde ω' es una frecuencia vibracional o rotacional de la molécula. El campo eléctrico se desarrolla como:

$$| \mathbf{E} | = E_0 \cos \omega t \quad (16)$$

de manera que:

$$\mu(t) = \alpha_0 E_0 \cos \omega t + \frac{1}{2} \Delta \alpha E_0 (\cos (\omega + \omega') t + \cos (\omega - \omega') t) . \quad (17)$$

La frecuencia sin cambio es la radiación de Rayleigh, en tanto que las líneas de Stokes son $\omega - \omega'$, y las líneas de anti-Stokes son $\omega + \omega'$.

Los espectros de R son en general espectros de relatividad general unificada con mecánica cuántica, y la teoría expuesta más arriba es la teoría no relativista más sencilla posible, utilizada en el nivel clásico para ilustración. Por lo tanto, los espectros R brindan nueva información, la cual no puede hallarse en la teoría tradicional de dispersión Raman o Rayleigh. La conservación de la energía en la Ec. (12) es:

$$E_f - E_i = \hbar (\omega - \omega') \quad (18)$$

y la conservación del momento (no considerada hasta el presente) es:

$$\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i = \hbar (\boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{\kappa}') . \quad (19)$$

En dispersión inelástica de Rayleigh o dispersión neutrónica elástica:

$$\omega = \omega' \quad , \quad \boldsymbol{\kappa}^2 = \boldsymbol{\kappa}'^2 . \quad (20)$$

Los espectros de R para dispersión elástica de Rayleigh viene dada por la Ec. (43) del documento UFT 163:

$$m = \frac{\hbar \omega}{c^2} \quad , \quad R = \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \quad (21)$$

de manera que:

$$R = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 . \quad (22)$$

Aún cuando éste es un resultado sencillo, es un resultado de relatividad general. Por lo tanto, por primera vez, la relatividad general corregida por la teoría ECE ha sido incorporada en la teoría de absorción y dispersión.

3. Ejemplos de espectros R en procesos de absorción.

Algunos espectros R se han calculado numéricamente según las Ecs.(6-7). Utilizamos unidades atómicas con una masa para el electrón de $m_0 = 1$ y $c = 137.036018$. Esto evita el surgimiento de inestabilidades debido a exponentes con un amplio intervalo de variación. El primer ejemplo es la transición atómica $1s \rightarrow 2p$ del hidrógeno atómico. En la Fig. 1, se muestra la dependencia angular del argumento de la raíz cuadrada de la Ec. (6). Esto determina ya sea si el parámetro de curvatura es real o complejo. A partir de la Fig.1 podemos ver que el argumento de la raíz cuadrada varía como una función armónica y es negativo en la completa región angular. Por lo tanto, la curvatura posee un valor complejo y deben de utilizarse los valores promedio R_+ , R_- según las Ecs. (8-10). Estos se han representado gráficamente en la Fig. 2, mostrando que la estructura oscilatoria se cancela por completo y que la curvatura es constante a lo largo de todo el intervalo. Esta conducta es válida no sólo para espectros ópticos sino también para espectros de absorción de rayos X. A valores crecientes de

energía, la curvatura se desvía a partir del valor constante cerca de los límites $\theta = 0$ y $\theta = \pi$, como puede observarse en la Fig. 3. La desviación es masiva, es decir de varios órdenes de magnitud.

Para observar los efectos de radiación dura de rayos X hemos estudiado el intervalo $E_b \approx E_{00}$, es decir la energía de unión es cercana a la energía en reposo del electrón, el caso "ultra-relativista". La energía total E_1 se define mediante:

$$E_1 = E_{00} - E_b \quad . \quad (23)$$

Para $E_b = 0.95 E_{00}$ (Fig. 4), la región en ambos extremos se ha ampliado significativamente, pero la región central constante con valores complejos aún está allí. Ambas curvaturas R_+ , R_- cambian suavemente la una hacia la otra, recordando la conducta de funciones analíticas complejas. Para $E_b = E_{00}$ (lo cual significa un energía total en desaparición) obtenemos una estructura de R muy sencilla: una línea de cero y una parábola. La línea de cero indica la ausencia de curvatura, lo cual significa que el electrón ha sido destruido.

Podemos incluso extender la investigación para valores de energías totales negativas, aún cuando se considera a este caso como superfluo en la teoría ECE debido a que no hay necesidad de asumir un mar de electrones de Dirac. A partir de la Fig. 6 (para $E_b = 1.05 E_{00}$) podemos ver que la línea de curvatura cero desaparece entonces, y nuevamente aparece la curvatura.

Finalmente consideramos los espectros Raman descritos a través de las Ecs (12-13). Los resultados muestran que los parámetros R son independientes del ángulo, en la misma forma mostrada en la Fig.1. Esto puede observarse fácilmente a partir de la parte inferior de la Ec. (13). Las frecuencias ω , ω' entran sólo en el parámetro A. Debido a que

$$\hbar\omega \ll E_{00}, \quad \hbar\omega' \ll E_{00} \quad (24)$$

en la espectroscopía Raman, el parámetro A no depende significativamente de las frecuencias. Por lo tanto, R se comporta de una manera muy similar a la de los espectros de absorción ya discutidos, conduciendo a una falta de dependencia angular en la región de baja energía. En total todos estos espectros de baja energía son independientes del ángulo de dispersión, en la medida en que no se consideren orbitales cuánticos, lo cual iría más allá del alcance de este documento.

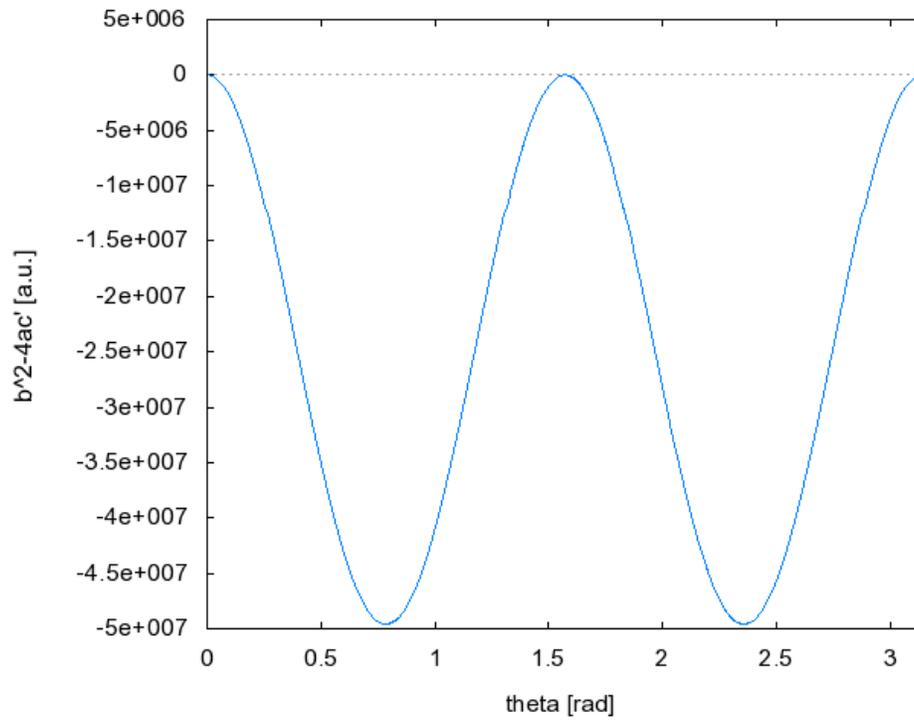


Figura 1. Dependencia angular del argumento de la raíz cuadrada en la Ec. (6) para la transición $1s \rightarrow 2p$ del hidrógeno.

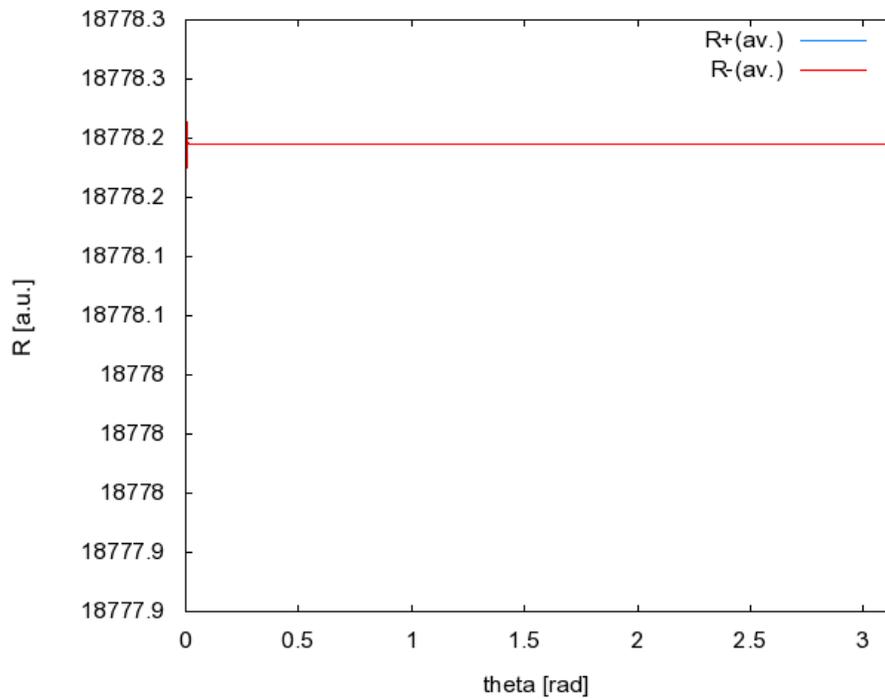


Figura 2. Dependencia angular de los parámetros de curvatura promedio R_+ , R_- para la transición $1s \rightarrow 2p$ del hidrógeno.

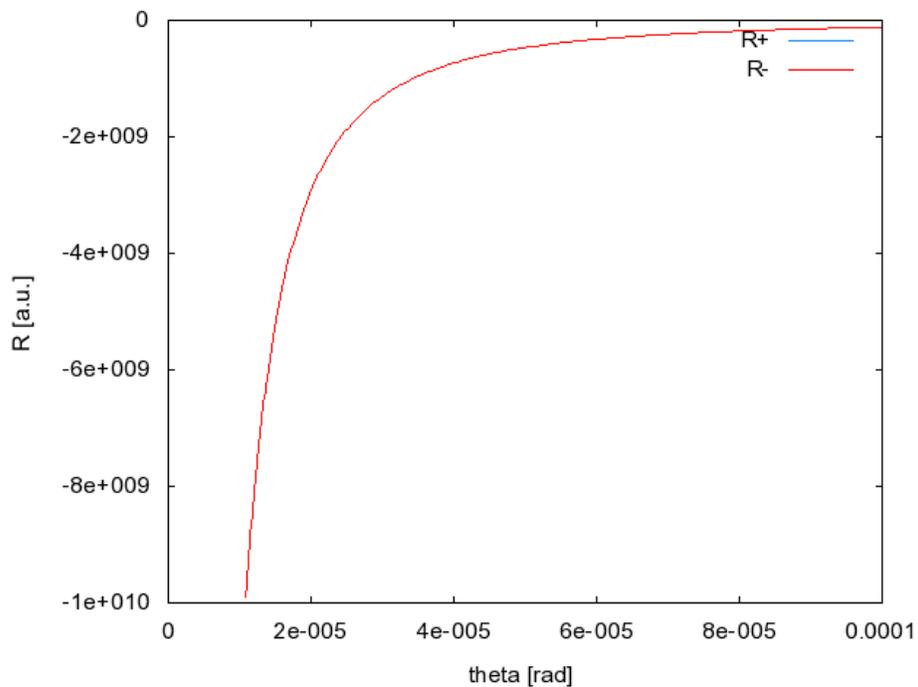


Figura 3. Dependencia angular del parámetro de curvatura R_- para ángulos pequeños θ , en la absorción de rayos X del estado 1s del Ca (4038.5 eV).

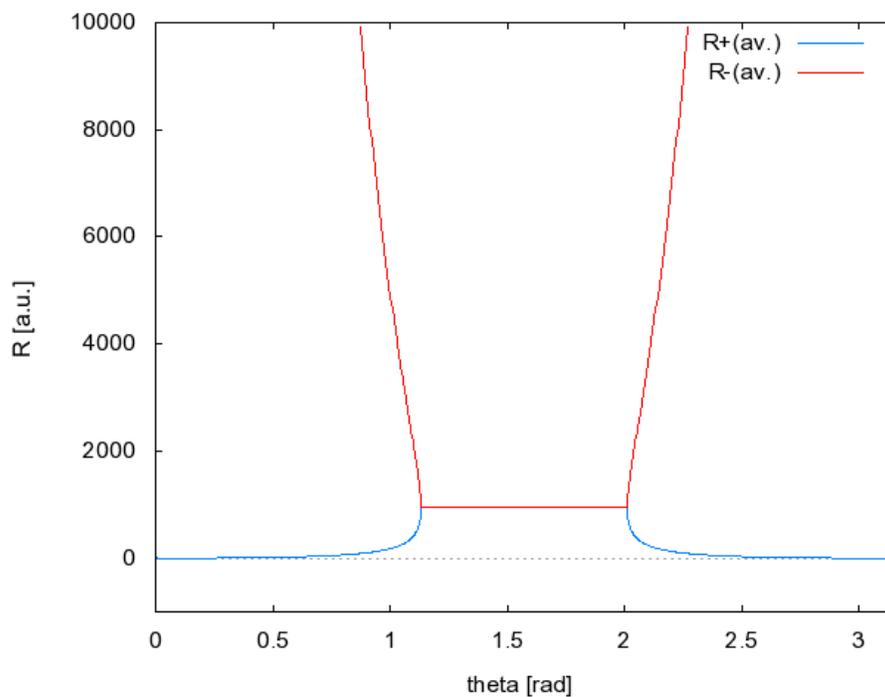


Figura 4. Dependencia angular de los parámetros promedio de curvatura R_+ , R_- para pequeños ángulos θ , $\Delta E = 0.95 E_{00}$.

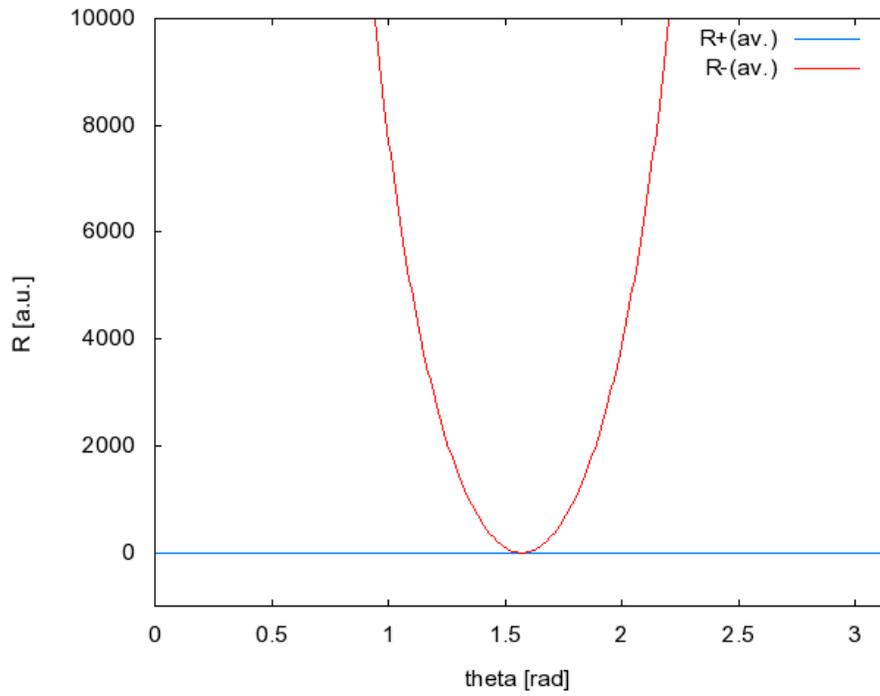


Figura 5. Dependencia angular de los parámetros promedio de curvatura R_+ , R_- para ángulos pequeños θ , $\Delta E = E_{00}$.

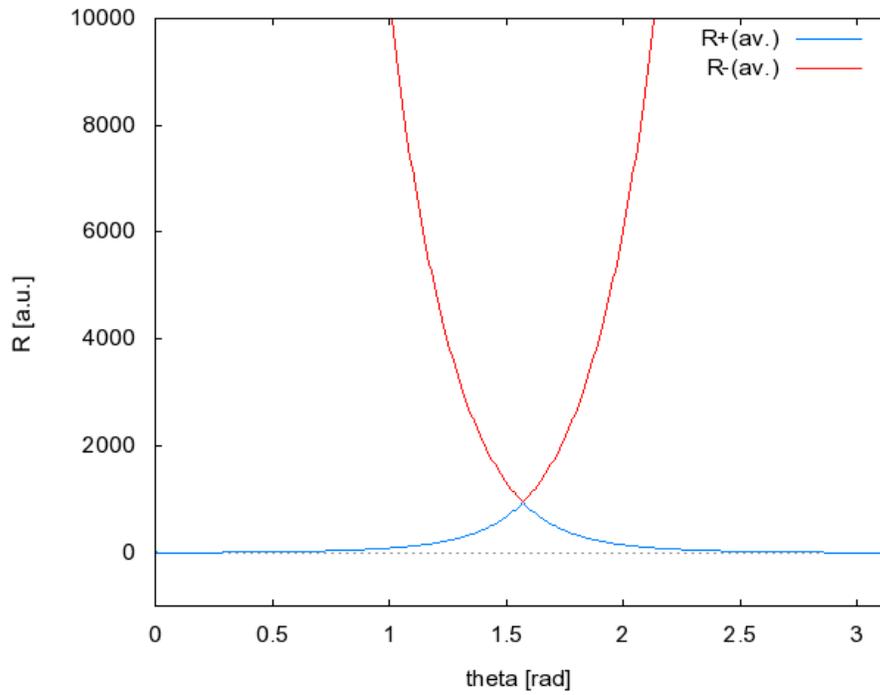


Figura 6. Dependencia angular de los parámetros promedio de curvatura R_+ , R_- para pequeños ángulos θ , $\Delta E = 1.05 E_{00}$.

Agradecimientos.

Se agradece al gobierno británico por una Pensión Civil vitalicia y otros altos honores en reconocimiento de la teoría ECE y otros trabajos. Se agradece al grupo de trabajo de AIAS por muchas discusiones interesantes. Se agradece a Alex Hill y colegas por el tipografiado voluntario y muchas exitosas traducciones al castellano, a David Burleigh por su publicación voluntaria en el portal www.aias.us, y a Simon Clifford por su asistencia voluntaria en las grabaciones.

Referencias.

- [1] M. W. Evans et al., “Generally Covariant Unified Field Theory” (Abramis 2005 y siguientes), en siete volúmenes a la fecha.
- [2] M. W. Evans, S. Crothers, H. Eckardt y K. Pendergast, “Criticisms of the Einstein Field Equation” (Abramis en prensa, preimpresión en www.aias.us).
- [3] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, “Applications of ECE Theory to Hydrogen Bonding” (Academia de Ciencias de Serbia, 2010).
- [4] K. Pendergast, “The Life of Myron Evans” (Abramis en prensa, preimpresión en www.aias.us).
- [5] L. Felker, “The Evans Equations of Unified Field Theory” (Abramis 2007, traducción al castellano en www.aias.us).
- [6] M. W. Evans et al., the Omnia Opera de www.aias.us.
- [7] M. W. Evans y J.-P. Vigié, “The Enigmatic Photon” (Kluwer, Dordrecht, 1994 a 2002) en cinco volúmenes disponibles en la sección de Omnia Opera de www.aias.us.
- [8] M. W. Evans y L. B. Crowell, “Classical and Quantum Electrodynamics and the B(3) Field” (World Scientific, 2001).
- [9] M. W. Evans y A. A. Hasanein, “The Photomagnetron in Quantum Field Theory” (World Scientific, 1994).
- [10] M. W. Evans y S. Kielich (eds.), “Modern Non-Linear Optics” (Wiley primera y segunda ediciones, 1992, 1993, 1997, 2001 y ediciones en libro e).
- [11] Los portales de la teoría ECE www.aias.us (archivados en la Biblioteca Nacional de Gales y en los archivos de portales británicos www.webarchive.org.uk, www.atomicprecision.com, www.et3m.net, www.upitec.org).
- [12] S. P. Carroll, “Spacetime and Geometry: an Introduction to General Relativity” (Addison Wesley, Nueva York, 2004).