Desarrollo del Hamiltoniano de la Resonancia de Órbita de Espín Electrónica (ROEE).

por

M. W. Evans y H. Eckardt,

Civil List y AIAS

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

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net)

Resumen.

Se desarrolla el hamiltoniano para la resonancia orbital de espín electrónica para demostrar que posee una rica estructura general y que se trata de una forma enteramente novedosa de espectroscopía de resonancia. El desarrollo se vuelve posible a través de un empleo novedoso de álgebra de Pauli. Se demuestra que el hamiltoniano provee resultados que son diferentes de aquellos del anómalo efecto Zeeman. El hamiltoniano se obtiene a partir de la ecuación del fermión de la teoría ECE o de la ecuación quiral de Dirac, lo cual brinda mucha confianza acerca de su eventual verificación experimental.

Palabras clave: Ecuación del fermión de la teoría ECE, resonancia orbital de espín electrónica (ROEE).

1. Introducción.

En el documento inmediatamente precedente a éste, en esta serie de 250 documentos a la fecha [1 – 10], la ecuación del fermión de la teoría ECE se utilizó para producir una nueva forma de espectroscopía de resonancia, denominada resonancia de órbita de espín electrónica (ROEE). La nueva espectroscopía ROEE emerge de la ecuación del fermión (o ecuación quiral de Dirac) a partir de un empleo novedoso del álgebra de Pauli. En la Sección 2, se desarrolla el hamiltoniano de ROEE, el cual se refina respecto del hamiltoniano original de la ecuación del fermión, y se muestra que consiste de dos partes principales, una independiente y otra dependiente del vector posición *r*. De manera que los eigenvalores de energía del hamiltoniano deben de evaluarse tomando en cuenta esta dependencia espacial, lo cual trae como resultado un conjunto rico en nuevos resultados. En la Sección 3, se incluyen algunos ejemplos para el hidrógeno utilizando álgebra computacional y gráficas.

2. Cálculo del Hamiltoniano de la ROEE.

Consideremos el hamiltoniano de la ecuación del fermión (o ecuación quiral de Dirac) en la aproximación usual [1 – 10]:

$$E\psi = \left(mc^2 + e\phi + \frac{1}{2m}\underline{\sigma}\cdot(\underline{p} - e\underline{A})\left(1 + \frac{e\phi}{2mc^2}\right)\underline{\sigma}\cdot(\underline{p} - e\underline{A})\right)\psi \qquad (1)$$

Aquí, *m* es la masa de un electrón que interactúa con un campo electromagnético con un potencial escalar y un potencial vectorial *A*, y - *e* es la carga en el electrón los cálculos completos se incluyen en la nota de acompañamiento 250(7) de este documento incluido en el portal www.aias.us. Aquí consideramos un término en la ecuación completa (1), es decir :

$$H_1\psi = -\frac{e}{2m}\left(\underline{\sigma}\cdot\underline{A}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{p} + \underline{\sigma}\cdot\underline{p}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{A}\right)\psi \qquad (2)$$

Considerando a $\underline{\sigma}$ como una función, este término puede desarrollarse como:

$$H_1\psi = -\frac{e}{2m}\left(\underline{A}\cdot\underline{p} + \underline{p}\cdot\underline{A} + i\underline{\sigma}\cdot\underline{A}\times\underline{p} + i\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\times\underline{A}\right)\psi \qquad (3)$$

utilizando álgebra de Pauli [11]. Para un campo magnético uniforme:

$$\underline{A} = \frac{1}{2}\underline{B}\times\underline{r} \qquad (4)$$

de manera que:

$$H_1 \psi = -\frac{e}{4m}\Big(\underline{B}\times\underline{r}\cdot\underline{p} + \underline{p}\cdot\underline{B}\times\underline{r} + i\underline{\sigma}\cdot(\underline{B}\times\underline{r})\times\underline{p} + i\underline{p}\times(\underline{B}\times\underline{r})\Big)\psi . \tag{5}$$

Considerando a $\underline{p}$ como una función:

$$\underline{B}\times\underline{r}\cdot\underline{p} = \underline{B}\cdot\underline{r}\times\underline{p} = \underline{B}\cdot\underline{L} \tag{6}$$

de manera que el hamiltoniano (3) deviene:

$$H_1\psi = -\frac{e}{2m}\underline{L}\cdot\underline{B}\psi + \left(i\underline{\sigma}\cdot\underline{A}\times\underline{p} + i\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\times\underline{A}\right)\psi . \tag{7}$$

A esta altura, se considera a $\underline{p}$ como un operador, de manera que el segundo término a la derecha de la igualdad en la Ec.(7) no desaparece. El empleo de $\underline{p}$ y $\underline{\sigma}$ como funciones u operadores resulta arbitrario, y se justifica sólo mediante una comparación exitosa con datos experimentales. A partir de las Ecs. (4) y (7), el hamiltoniano puede expresarse como:

$$H_1\psi = \left(-\frac{e}{2m}\underline{L}\cdot\underline{B} - \frac{e\hbar}{2m}\underline{\sigma}\cdot\underline{B} + \dots\right) = -\frac{e}{2m}\left(\underline{L} + 2\underline{S}\right)\psi \tag{8}$$

Se conserva el momento angular total, de manera que el resultado (8) se re expresa como:

$$H_1\psi = -\frac{e}{2m} g_L \underline{J}\cdot\underline{B}\psi \tag{9}$$

donde g_L es el factor de Landé. En la Nota 250(2) se incluye una deducción completa de la Ec. (9). Aquí, $\underline{J}$ se define mediante:

$$\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}, \dots, |\underline{L} - \underline{S}| \tag{10}$$

que constituye una serie de Clebsch Gordan. El término convencional de órbita de espín emerge a partir de otro término del hamiltoniano del fermión:

$$H_{os}\psi = \frac{e}{4mc^2}\underline{\sigma}\cdot(\underline{p} - e\underline{A})\phi\,\underline{\sigma}\cdot(\underline{p} - e\underline{A})\psi \tag{11}$$

en donde el primer $\underline{p}$ se considera como un operador, pero en el cual el segundo $\underline{p}$ se considera como una función, tal como se describe en la nota de acompañamiento 248(8) del documento UFT248 en el portal www.aias.us. De manera que el hamiltoniano de órbita de espín convencional es:

$$H_{os}\psi = -\frac{ie\hbar}{4m^2c^2}\left(\underline{\sigma}\cdot\underline{\nabla}\phi\,\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\right)\psi \tag{12}$$

La suposición tradicional:

$$\underline{E} = -\underline{\nabla}\phi \tag{13}$$

se emplea ahora para encontrar que:

$$H_{os}\psi = -\frac{ie\hbar}{4m^2c^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{E}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{p}. \tag{14}$$

A esta altura, se considera a $\underline{\sigma}$ como una función, de manera que:

$$\underline{\sigma}\cdot\underline{E}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{p} = \underline{E}\cdot\underline{p} + i\,\underline{\sigma}\cdot\underline{E}\times\underline{p} \tag{15}$$

y la parte con valor real del hamiltoniano de orbital de espín es:

$$\hat{H}_{os} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{E}\times\underline{p}\,. \tag{16}$$

Finalmente, se utiliza la ley tradicional de Coulomb:

$$\underline{E} = -\underline{\nabla}\phi = \frac{-e}{4\pi\epsilon_0 r^3}\,\underline{r} \tag{17}$$

de manera que:

$$H_{os}\psi = \frac{-e\hbar}{8\pi c^2\epsilon_0 m^2 r^3}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{L} \tag{18}$$

donde el momento angular clásico es:

$$\underline{L} = \underline{r}\times\underline{p}\,. \tag{19}$$

Por lo tanto, el completo hamiltoniano de REE convencional es:

$$\hat{H}\psi = \left(-\frac{e}{2m}\underline{L}\cdot\underline{B} - \frac{e\hbar}{2m}\underline{\sigma}\cdot\underline{B} - \xi\,\underline{S}\cdot\underline{L}\right)\psi \tag{20}$$

donde la constante de acoplamiento orbital de espín es

$$\xi = \frac{e}{4\pi c^2 \epsilon_0 m^2 r^3} \tag{21}$$

Finalmente, se considera como operadores tanto a S como a L, para encontrar que:

$$\hat{\underline{S}}\cdot\hat{\underline{L}}\,\psi = \frac{\hbar^2}{2}\Big(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\Big)\psi \tag{22}$$

Sin embargo, existen varias otras formas de desarrollar el hamiltoniano original de la ecuación del fermión, y la ROEE constituye el resultado de una de estas formas.

Utilizando álgebra de Pauli [11]:

$$\underline{\sigma}\cdot\underline{p} = \frac{1}{r^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{r}\left(\underline{r}\cdot\underline{p} + i\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\right) \tag{23}$$

$$\underline{\sigma}\cdot\underline{A} = \frac{1}{r^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{r}\left(\underline{r}\cdot\underline{A} + i\underline{\sigma}\cdot\underline{r}\times\underline{A}\right) \tag{24}$$

Para un campo magnético uniforme:

$$\underline{r}\cdot\underline{A} = 0 \tag{25}$$

de manera que:

$$\underline{p}\cdot\underline{A} = \frac{1}{r^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{A}\times\underline{r} \tag{26}$$

y

$$\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\times\underline{A} = \frac{1}{r^2}\underline{r}\cdot\underline{p}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{r}\times\underline{A} \tag{27}$$

como en la nota de acompañamiento 250(7). Utilizando estos resultados se encuentra que:

$$H_1\psi = -\frac{e}{2m}\left(\underline{p}\cdot\underline{A} + \underline{A}\cdot\underline{p}\right)\psi$$
$$= -\frac{e}{mr^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{A}\times\underline{r}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\,\psi \tag{28}$$

Introducimos ahora el operador

$$\underline{S} = \frac{1}{2}\hbar\underline{\sigma} \tag{29}$$

de manera que:

$$H_1\psi = -\frac{2e}{\hbar mr^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{A}\times\underline{r}\,\underline{S}\cdot\underline{L}\,\psi \tag{30}$$

Para un campo magnético uniforme:

$$\underline{A} = \frac{1}{2}\underline{B}\times\underline{r} \tag{31}$$

de manera que

$$\underline{A}\times\underline{r} = \frac{1}{2}\left(\underline{B}\times\underline{r}\right)\times\underline{r} = \frac{1}{2}\left(\underline{r}\left(\underline{r}\cdot\underline{B}\right) - r^2\underline{B}\right) \tag{32}$$

lo cual da origen al hamiltoniano en la forma:

$$H_1\psi = \frac{e}{\hbar m}\,\underline{\sigma}\cdot\left(\underline{B} - \frac{\underline{r}}{r^2}\left(\underline{r}\cdot\underline{B}\right)\right)\hat{\underline{S}}\cdot\hat{\underline{L}}\,\psi$$
$$= -\frac{e}{2m}\left(\underline{p}\cdot\underline{A} + \underline{A}\cdot\underline{p}\right)\psi \tag{33}$$

Su valor esperado es:

$$\langle\hat{H}\rangle = \frac{e}{\hbar m}\int \psi^* \hat{H}\psi\, d\tau \tag{34}$$

donde la integración se lleva a cabo sobre todo el espacio y donde se normaliza la función de onda:

$$\int \psi^* \psi \, d\tau = 1. \tag{35}$$

Utilizamos el resultado:

$$\begin{aligned} \hat{S} \cdot \hat{L} \psi &= \frac{1}{2}\left(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2\right)\psi \\ &= \frac{\hbar^2}{2}\left(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\right)\psi \end{aligned} \tag{36}$$

Por lo tanto, al igual que en la nota de acompañamiento 250(9), los eigenvalores de energía son:

$$E = \frac{e\hbar}{2m}\left(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\right)\left(\underline{\sigma} \cdot \underline{B} - \int \psi^* \frac{\underline{\sigma} \cdot \underline{r}}{r^2} \, \underline{r} \cdot \underline{B} \, \psi \, d\tau\right) \tag{37}$$

En coordenadas polares esféricas:

$$\begin{aligned} X &= r \operatorname{sen}\theta \cos\phi \\ Y &= r \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi \\ Z &= r \cos\theta \end{aligned} \tag{38}$$

la integración de una función f sobre todo el espacio significa que:

$$\int f \, d\tau = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{0}^{\infty} f \, r^2 \operatorname{sen}\theta \, dr \, d\theta \, d\phi \tag{39}$$

Si el campo magnético se encuentra alineado según el eje Z, entonces en coordenadas cartesianas:

$$\frac{\underline{\nu}\cdot\underline{r}}{r^2}\,\underline{r}\cdot\underline{B} = \frac{\nu_z Z^2 B_z}{X^2+Y^2+Z^2} \tag{40}$$

Si se supone en promedio que:

$$\left\langle \frac{Z^2}{X^2+Y^2+Z^2} \right\rangle = \frac{1}{3} \tag{41}$$

entonces la Ec. (37) se reduce a

$$E = \frac{1}{3}\frac{e\hbar}{m}\nu_z B_z \left(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\right) \tag{42}$$

y la resonancia orbital de espín electrónica (ROEE) se produce en:

$$\omega = \frac{2}{3}\frac{e}{m}B_z\left(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\right) \tag{43}$$

En coordenadas polares esféricas:

$$\frac{Z^2}{X^2+Y^2+Z^2} = \cos^2\theta \tag{44}$$

de manera que:

$$\int \psi^* \frac{\underline{r}\cdot\underline{r}}{r^2}\,\underline{r}\cdot\underline{B}\,\psi\,d\tau = B_z\nu_z \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} \psi^* \cos^2\theta\,\psi\,r^2 \operatorname{sen}\theta\,dr\,d\theta\,d\phi \tag{45}$$

Se observa que esta parte del hamiltoniano es dependiente de *r*, y debe de evaluarse para cada función de onda ψ. Es bien sabido que las únicas funciones de onda analíticas son las funciones de onda hidrogénicas. De manera que se utiliza álgebra computacional en la Sección 3 de este documento para evaluar algunos resultados. Por ejemplo, el orbital $2p_z$ es:

$$\psi_{2p_z} = R_{21} Y_{10} = \psi^*_{2p_z} = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2\pi a_0^3}\right)^{1/2} \frac{r}{a_0} \cos\theta \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \tag{46}$$

de manera que en este caso:

$$\int \psi^* \frac{\underline{v} \cdot \underline{r}}{r^2} \underline{r} \cdot \underline{B} \psi \, d\tau = \frac{v_z B_z}{16 a_0^5} \int_0^\infty r^4 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) dr \int_0^\pi \cos^4\theta \, \operatorname{sen}\theta \, d\theta = 0 \tag{47}$$

Sin embargo, para otros orbitales esta parte del hamiltoniano produce valores no nulos de eigenvalores de energía en general, y un espectro ricamente estructurado.

3. Evaluación Numérica con Funciones de Onda Hidrogénicas.

Sección a cargo del Dr. Horst Eckardt

Agradecimientos.

Se agradece al Gobierno Británico por el otorgamiento de la Pensión Civil Vitalicia y a AIAS y otros por muchas discusiones interesantes. Se agradece a Dave Burleigh por su publicación en la red, a Alex Hill por las traducciones y a Robert Cheshire por las grabaciones.

Referencias.

[1] M. W. Evans, Ed., J. Found. Phys. Chem. (Cambridge International Science Publishing, CISP, www.cisp-publishing.com, 2011 en adelante).

[2] M. W. Evans, Ed., "Definitive Refutations of the Einsteinian General Relativity" (CISP 2012), número especial 6 de la ref. (1).

[3] M. W. Evans, S. J. Crothers, H. Eckardt y K. Pendergast, "Criticisms of the Einstein Field Equation" (CISP, 2011, preimpresión en el portal www.aias.us).

[4] M .W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, "Generally Covariant Unified Field Theory" (Abramis, 2005 a 2011) en siete volúmenes.

[5] M. W. Evans y L. B. Crowell, "Classical and Quantum Electrodynamics and the B(3) Field" (World Scientific 2001).

[6] M .W. Evans y S. Kielich, Eds., "Modern Nonlinear Optics" (Wiley, Nueva York, 1992, 1993, 1997, 2001) en seis volúmenes y dos ediciones.

[7] M .W. Evans y J.-P. Vigier, "The Enigmatic Photon" (Kluwer, Dordrecht, 1994 a 2002), en diez volúmenes con encuadernación de tapa dura o blanda.

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

[9] M .W. Evans y A. A. Hasanein, "The Photomagneton in Unified Field Theory" (World Scientific 1994).

[10] M .W. Evans, "The Photon's Magnetic Field" (World Scientific, 1992).

[11] E. Merzbacher, "Quantum Mechanics" (Wiley, Nueva York 1971).