

# Nuevas Espectroscopías de Resonancia a Partir de la Ecuación del Fermión de la Teoría ECE.

por

M. W. Evans y H. Eckardt,

Civil List y AIAS

([www.webarchive.org.uk](http://www.webarchive.org.uk), [www.aias.us](http://www.aias.us), [www.atomicprecision.com](http://www.atomicprecision.com), [www.et3m.net](http://www.et3m.net)  
[www.upitec.org](http://www.upitec.org))

Traducción: Alex Hill ([www.et3m.net](http://www.et3m.net))

## Resumen.

La ecuación del fermión de la teoría ECE es equivalente a la forma quiral de la ecuación de Dirac para algunas aplicaciones, las cuales se ilustran en este documento a través de la inferencia de tres nuevos tipos de espectroscopía de resonancia, a partir de un conocido hamiltoniano que describe la interacción de un electrón con el campo electromagnético clásico. Los tres nuevos tipos de espectroscopía se ilustran utilizando las conocidas funciones de onda hidrogénicas, normalizadas correctamente mediante álgebra computacional. Se descubre que cada nuevo tipo de espectroscopía proporciona su propio patrón de frecuencias de resonancia, caracterizado por la función de onda hidrogénica utilizada.

*Palabras clave:* teoría ECE, ecuación del fermión, nuevas espectroscopías de resonancia.

## 1. Introducción.

En el documento precedente de esta serie [1 - 10] se ha desarrollado la ecuación del fermión de la teoría ECE con el objeto de presentar la nueva técnica de resonancia de acoplamiento orbital de espín electrónica. Se utilizan en este documento las mismas técnicas de empleo de la conocida álgebra de Pauli de una manera diferente, con el objeto de presentar tres nuevos tipos de espectroscopía de resonancia de espín, las cuales se ilustran mediante las funciones de onda hidrogénicas correctamente normalizadas mediante álgebra computacional. Se descubre que cada nuevo tipo de espectro posee su propio patrón de resonancia, y que depende de la función de onda hidrogénica utilizada. En la Sección 2, se define la parte relevante del hamiltoniano para la interacción del electrón según la teoría ECE con el campo electromagnético clásico, y esto se desarrolla con un empleo original del álgebra de Pauli, tal como sucedió en el documento precedente. Se descubre que el hamiltoniano da origen a tres tipos de espectroscopía de resonancia de espín desconocidos hasta el momento. Estos se desarrollan mediante las funciones de onda hidrogénicas, las cuales se normalizan correctamente mediante álgebra computacional. En la Sección 3, se representan gráficamente los espectros mediante álgebra computacional, y en teoría dan origen a diferentes patrones de resonancia para cada función de onda hidrogénica.

## 2. Desarrollo del hamiltoniano y de valores esperados de energía.

Consideremos la parte relevante del hamiltoniano completo [1 - 10] de la ecuación del fermión de la teoría ECE:

$$H = -\frac{e}{2m} \left( \underline{\sigma} \cdot \underline{p} \underline{\sigma} \cdot \underline{A} + \underline{\sigma} \cdot \underline{A} \underline{\sigma} \cdot \underline{p} \right) \quad (1)$$

donde  $-e$  es la carga sobre el electrón,  $m$  es su masa,  $\underline{p}$  es el momento lineal del electrón y  $\underline{A}$  es el potencial vectorial del campo electromagnético en la aproximación tradicional. En la física de la teoría ECE,  $\underline{A}$  se desarrolla ampliamente [1 - 10], y este desarrollo se incorporará en futuros documentos. Nótese cuidadosamente que la Ec. (1) es el conocido hamiltoniano que, por lo general, se desarrolla en un efecto Zeeman, REE, RMN y IRM. El nuevo tipo de desarrollo presentado en este documento y en el precedente se basa en el álgebra de Pauli presentada por Merzbacher [11]:

$$\begin{aligned} \underline{\sigma} \cdot \underline{p} &= \frac{\underline{\sigma} \cdot \underline{r}}{r^2} \underline{\sigma} \cdot \underline{r} \underline{\sigma} \cdot \underline{p} \\ &= \frac{\underline{\sigma} \cdot \underline{r}}{r^2} \left( \underline{r} \cdot \underline{p} + i \underline{r} \cdot \underline{r} \times \underline{p} \right) \\ &= \frac{\underline{\sigma} \cdot \underline{r}}{r^2} \left( \underline{r} \cdot \underline{p} + i \underline{r} \cdot \underline{L} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

donde el momento angular orbital clásico se define mediante:

$$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}. \quad (3)$$

Por lo tanto,  $r$  es el vector posición, que no aparece en el desarrollo habitual del efecto Zeeman y en REE.

El hamiltoniano (1) se cuantiza utilizando:

$$\hat{H}\psi = -\frac{e}{2m} \frac{\hbar}{i} (\underline{r} \cdot \underline{\nabla} \underline{\sigma} \cdot \underline{A} + \underline{\sigma} \cdot \underline{A} \underline{\nabla} \cdot \underline{r}) \psi \quad (4)$$

donde  $\hbar$  es la constante reducida de Planck y  $\psi$  es la función de onda. Nótese que [11]:

$$\underline{r} \cdot \underline{p} = \frac{\hbar}{i} \underline{r} \underline{e}_r \cdot \underline{\nabla} = \frac{\hbar}{i} \underline{r} \underline{e}_r \cdot \underline{e}_r \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} \quad (5)$$

donde el vector unitario radial se define como:

$$\underline{e}_r = \frac{\underline{r}}{r}. \quad (6)$$

Análogamente:

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{A} = \frac{\underline{\sigma} \cdot \underline{r}}{r^2} (\underline{r} \cdot \underline{A} + i \underline{\nabla} \cdot \underline{r} \times \underline{A}) \quad (7)$$

Para un campo magnético uniforme:

$$\underline{A} = \frac{1}{2} \underline{B} \times \underline{r} \quad (8)$$

en cuyo caso:

$$\underline{r} \cdot \underline{A} = 0 \quad (9)$$

y:

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{A} = i \frac{\underline{\nabla} \cdot \underline{r}}{r^2} \underline{\nabla} \cdot \underline{r} \times \underline{A}. \quad (10)$$

Se deduce entonces (Nota de Acompañamiento 251(1) de ese documento, incluido en el portal [www.aias.us](http://www.aias.us)) que:

$$(\underline{r} \cdot \underline{p} \underline{r} \cdot \underline{A}) \psi = \frac{\hbar}{r} \left( \underline{r} \cdot \underline{r} \times \underline{A} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} (\underline{r} \cdot \underline{r} \times \underline{A}) \psi \right) - \frac{1}{r^2} \underline{r} \cdot \underline{r} \times \underline{A} \underline{r} \cdot \underline{r} \psi \quad (11)$$

donde se ha utilizado el Teorema de Leibnitz. Utilizando la Ec. (8) resulta entonces que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \underline{r} \times \underline{A} &= \frac{1}{2r} \left( r^2 \underline{B} - \underline{r} (\underline{r} \cdot \underline{B}) \right) \\ &= \frac{r}{2} \left( \underline{B} - \underline{e}_r (\underline{B} \cdot \underline{e}_r) \right) \end{aligned} \quad (12)$$

y que:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \underline{r} \times \underline{A} = \underline{B} - \frac{1}{2r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \underline{e}_r (\underline{e}_r \cdot \underline{B}) \right) = \underline{B} - \underline{e}_r (\underline{e}_r \cdot \underline{B}) \quad (13)$$

Resulta entonces que:

$$\underline{r} \cdot \underline{p} \underline{r} \cdot \underline{A} \psi = \underline{r} \cdot \underline{B}_1 \left( \hbar \psi + \frac{1}{2} r \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{1}{2} \underline{r} \cdot \underline{r} \psi \right) \quad (14)$$

donde la densidad de flujo magnético modificada se define mediante:

$$\underline{B}_1 = \underline{B} - \underline{e}_r (\underline{e}_r \cdot \underline{B}). \quad (15)$$

Por lo tanto, el hamiltoniano (4) puede definirse como:

$$\hat{H} \psi = -\frac{e \hbar}{2m} \underline{r} \cdot \underline{B}_1 \left( \psi + r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{e}{2m} \underline{r} \cdot \underline{B}_1 \underline{r} \psi \quad (16)$$

dando origen a tres tipos de espectroscopía de resonancia desconocidos hasta el momento.

El desarrollo convencional del hamiltoniano (4) es bien conocido, y no incluye la información que se obtiene en la Ec. (16):

$$\begin{aligned}
 \hat{H}\psi &= i\frac{e\hbar}{2m}(\nabla \cdot (\underline{A}\psi) + \underline{A} \cdot \nabla\psi) \\
 &\quad - \frac{e\hbar}{2m} \nabla \cdot (\nabla \times (\underline{A}\psi) + \underline{A} \times \nabla\psi) \\
 &= -\frac{e\hbar}{2m} \nabla \cdot \underline{B} + i\frac{e\hbar}{2m} (\nabla \cdot \underline{A})\psi + 2\nabla\psi \cdot \underline{A}
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

utilizando la aproximación establecida:

$$\underline{B} = \nabla \times \underline{A}
 \tag{18}$$

Se incluyen más detalles de estos cálculos en la Nota de Acompañamiento 251(1) en el portal [www.aias.us](http://www.aias.us).

Al igual que en la Nota 251(2) en el portal [www.aias.us](http://www.aias.us), es posible identificar tres tipos diferentes de hamiltoniano:

$$\hat{H}_1\psi = -\frac{e\hbar}{2m} \nabla \cdot \underline{B}_1\psi
 \tag{19}$$

$$\hat{H}_2\psi = -\frac{e\hbar}{2m} \nabla \cdot \underline{B}_1 r \frac{\partial\psi}{\partial r}
 \tag{20}$$

$$\hat{H}_3\psi = \frac{e}{2m} \nabla \cdot \underline{B}_1 \nabla \cdot \underline{A}\psi
 \tag{21}$$

cuyos valores esperados de energía son:

$$E_1 = -\frac{e\hbar}{2m} \int \psi^* \nabla \cdot \underline{B}_1 \psi d\tau
 \tag{22}$$

$$E_2 = -\frac{e\hbar}{2m} \int \psi^* \nabla \cdot \underline{B}_1 r \frac{\partial\psi}{\partial r} d\tau
 \tag{23}$$

$$E_3 = \frac{e}{2m} \int \psi^* \nabla \cdot \underline{B}_1 \nabla \cdot \underline{A}\psi d\tau
 \tag{24}$$

donde la integración se lleva a cabo sobre todo el espacio incluido en la normalización de

Born [11]:

$$\int \psi^* \psi dz = 1. \quad (25)$$

Los valores esperados de energía pueden ilustrarse en su nivel más sencillo mediante las funciones de onda hidrogenicas. Estas se normalizan correctamente mediante algebra computacional, y las primeras se incluyen en una tabla en la Sección 3. El método se ilustra con todo detalle en la Nota de Acompañamiento 251(3) y aquí se incluyen algunos detalles de los principios para la función de onda hidrogenica:

$$\psi = N r e^{-\alpha r} \quad (26)$$

Si el campo magnético se alinea según el eje Z, entonces:

$$\nabla \cdot \mathbf{B}_1 = \sigma_z \mathcal{B}_z - \frac{Z \mathcal{B}_z}{r^2} \quad \nabla \cdot \mathbf{r} = \frac{\mathcal{B}_z}{r^2} (Z^2 \sigma_z + YZ \sigma_y + XZ \sigma_x) \quad (27)$$

Sin embargo, el único componente bien definido del momento angular de espín en la mecánica cuántica es [11]:

$$\hat{S}_z \psi = \pm \frac{1}{2} \hbar \psi \quad (28)$$

de manera que el único término la relevancia en la Ec. (27) es:

$$\nabla \cdot \mathbf{B}_1 = \left(1 - \left(\frac{Z}{r}\right)^2\right) \sigma_z \mathcal{B}_z \quad (29)$$

En coordenadas polares esféricas:

$$1 - \left(\frac{Z}{r}\right)^2 = 1 - \cos^2 \theta = \sin^2 \theta \quad (30)$$

y resulta entonces que los valores esperados de energía son:

$$E_1 = -\frac{e^2 \hbar}{2m} \sigma_z \mathcal{B}_z \int \psi^* \sin^2 \theta \psi dz \quad (31)$$

$$F_2 = -\frac{e\hbar}{2m} \nabla_z B_z \int \psi^* \sin^2 \theta r \frac{\partial \psi}{\partial r} dz \quad (32)$$

$$F_3 = \frac{e}{2m} \nabla_z B_z \int \psi^* \sin^2 \theta \nabla_r \cdot \underline{\underline{L}} \psi dz \quad (33)$$

El operador de momento angular de espín se define [11] como:

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}_z \quad (34)$$

a partir del cual es bien conocido que el operador de orbital de espín es:

$$\hat{S}_z \cdot \hat{L} \psi = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \psi \quad (35)$$

donde la serie de Clebsch Gordan da:

$$j = l+s, l+s-1, \dots, |l-s|$$

$$m_j = m_l + m_s.$$

$$(36)$$

$$(37)$$

En estas expresiones:

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (38)$$

y la resonancia de espín puede inducirse entre los estados de  $\sigma_z$ . Los tres diferentes tipos de espectros de resonancia son:

$$w_1 = \frac{e B_z}{m} \int \psi^* \sin^2 \theta \psi dz \quad (39)$$

$$w_2 = \frac{e B_z}{m} \int \psi^* r \sin^2 \theta \frac{\partial \psi}{\partial r} dz \quad (40)$$

$$w_3 = \frac{e B_z}{m} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \int \psi^* \sin^2 \theta \psi dz \quad (41)$$

En el cálculo de la Ec. (41) se utiliza la ecuación de Clebsch Gordan (37), tal como se describe en la Sección 3, de manera que la función de onda corresponde a los números cuánticos en la manera correcta. En cada caso, las frecuencias de resonancia dependen de la función de onda considerada, lo cual conduce a tres nuevos tipos de espectroscopia ricamente estructurados, y abriendo las puertas a una nueva área de química cuántica computacional.

En coordenadas polares esféricas:

$$d\mathcal{V} = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi \quad (42)$$

de manera que las integrales se evalúan de la siguiente manera utilizando álgebra computacional como también se observa en la Sección 3:

$$\int_{r=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \psi^* r^2 \sin^4\theta \psi dr d\theta d\phi \quad (43)$$

y

$$\int_{r=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \psi^* r \sin^2\theta \frac{\partial \psi}{\partial r} dz = \int_{r=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \psi^* r^3 \sin^4\theta \frac{\partial \psi}{\partial r} dr d\theta d\phi \quad (44)$$

En general:

$$\psi = \psi(r, \theta, \phi) \quad (45)$$

En la Nota de Acompañamiento 251(5) incluida en el portal [www.aias.us](http://www.aias.us) se distinguen cuidadosamente estos resultados respecto del efecto Zeeman, el cual se describen mediante:

$$\hat{H}\psi = -\frac{e\hbar}{2m} g_L \frac{\mathbf{L}}{\hbar} \cdot \mathbf{B} \psi \quad (46)$$

donde  $g_L$  es el conocido factor de Lande [11]. El efecto Zeeman se deduce a partir del desarrollo tradicional del hamiltoniano (4) y da origen a un espectro completamente diferente.

En las Notas de Acompañamiento 251(3) y 251(4) se incluyen algunos cálculos manuales como ejemplo, utilizando las útiles integrales definidas:

$$\int_0^{\infty} r^n e^{-ar} dr = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (47)$$

$$\int_0^{\pi} \cos^n \theta \sin \theta d\theta = \frac{1 + (-1)^n}{n+1} \quad (48)$$



$$\int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \, d\phi = \pi. \quad (49)$$

Dos ejemplos resultan suficientes para completar esta sección, utilizando uno de los tipos más sencillos de funciones de onda hidrogenicas:

$$\psi = N r e^{-dr} \quad (50)$$

donde N es la normalización:

$$N = \left( \frac{\alpha^5}{\pi} \right)^{1/2} \quad (51)$$

y en coordenadas polares esféricas:

$$\chi = r \sin \theta \cos \phi \quad (52)$$

El valor esperado de energía es:

$$E_1 = -\frac{e^2 \hbar}{2m} \int \psi^* \psi (1 - \cos^2 \theta) \, d\tau \quad (53)$$

y una de las integrales a evaluarse es:

$$\begin{aligned} I &= \frac{\alpha^5}{\pi} \int_0^\infty r^4 e^{-2\alpha r} \, dr \int_0^\pi \sin^3 \theta \cos^2 \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \, d\phi \\ &= \frac{3}{4} \int_0^\pi \sin^3 \theta \cos^2 \theta \, d\theta \\ &= \frac{3}{4} \left( \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta \, d\theta - \int_0^\pi \cos^4 \theta \sin \theta \, d\theta \right) \\ &= 1/3. \end{aligned} \quad (54)$$

Obviamente, el cálculo manual se vuelve poco práctico muy rápidamente, de manera que los

valores esperados de energía dados en las Ecs. (39) a (41) se evalúan mediante álgebra computacional en la Sección 3, donde se les incluye en una tabla.

El segundo ejemplo es la evaluación de:

$$E_z = -\frac{e\hbar}{2m} \alpha_z B_z \int \psi^* r \sin^2 \theta \frac{\partial \psi}{\partial r} dz \quad (55)$$

donde una diferenciación de la función de onda debe llevarse a cabo respecto de  $r$ :

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = N \sin \theta \cos \phi e^{-\alpha r} (1 - \alpha r) \quad (56)$$

Por lo tanto:

$$E_z = -\frac{e\hbar}{2m} N^2 \alpha_z B_z \int r \sin^4 \theta \cos^2 \phi (1 - \alpha r) e^{-2\alpha r} dz \quad (57)$$

Utilizando la integral establecida:

$$\int \sin^4 \theta d\theta = \frac{3\theta}{8} - \frac{\sin 2\theta}{4} + \frac{\sin 4\theta}{32} \quad (58)$$

se encuentra que:

$$E_z = -\frac{3}{16} \pi e \hbar \alpha^3 \alpha_z B_z \int_0^\infty r (1 - \alpha r) e^{-2\alpha r} dr \quad (59)$$

En estos cálculos:

$$\int_0^\infty r e^{-2\alpha r} dr = \frac{1}{4\alpha^2}; \quad \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha r} dr = \frac{1}{4\alpha^3} \quad (60)$$

Para esta función de onda en particular se encuentra que:

$$\mathbb{F}_2 = 0$$

(61)

Pero tal como se demuestra en la Sección 3, los valores esperados de energía son en general distintos de cero, dando origen a un nuevo tipo de espectro de resonancia de espín.

### 3. Cálculo de valores probables de energía de las funciones de onda hidrogénicas y frecuencias de resonancia.

Sección a cargo del Dr. Horst Eckardt.

## Agradecimientos.

Se agradece al Gobierno Británico por la Pensión Civil Vitalicia y al equipo técnico de AIAS por muchas discusiones interesantes. Se agradece a Dave Burleigh por sus publicaciones en la red, a Robert Cheshire por las grabaciones y a Alex Hill por las traducciones y las grabaciones.

## Referencias.

- [1] M. W. Evans, Ed., "Definitive Refutations of the Einsteinian General Relativity" (Cambridge International Science Publishing, CISP, [www.cisp-publishing.com](http://www.cisp-publishing.com), 2012), publicación especial seis de la ref. (2)
- [2] M. W. Evans, ed., *Journal of Foundations of Physics and Chemistry*, (CISP 2011).
- [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](http://www.aias.us)).
- [4] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, "Generally Covariant Unified Field Theory" (Abramis Academic, 2005 - 2011), en siete volúmenes.
- [5] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, documentos y plenaria de la Academia de Ciencias de Serbia, 2010 al presente.
- [6] L. Felker, "The Evans Equations of Unified Field Theory" (Abramis Academic, 2007, Traducción al castellano por Alex Hill en el portal [www.aias.us](http://www.aias.us)).
- {7} M. W. Evans y L. B. Crowell, "Classical and Quantum Electrodynamics and the B(3) Field" (World Scientific, 2001).
- [8] M. W. Evans y S. Kielich, Eds., "Modern Nonlinear Optics" (Wiley Interscience, Nueva York, 1992, 1993, 1997, 2001) en seis volúmenes y dos ediciones.
- [9] M. W. Evans y J.-P. Vigié, "The Enigmatic Photon" (Kluwer, Dordrecht, 1994 a 2002) en cinco volúmenes con encuadernación dura o blanda.
- [10] M. W. Evans y A. A. Ilasanein, "The Photomagnetron in Quantum Field Theory" (World Scientific, 1994).
- [11] E. Merzbacher, "Quantum Mechanics" (Wiley, Nueva York, 1970).