Nuevos tipos de Espectroscopía de Resonancia de Espín Electrónico (REE) y de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) a partir de la Teoría ECE2.

por

M. W. Evans y H. Eckardt,
Civil List, AIAS y UPITEC

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

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net)

Resumen.

Se utiliza la teoría del campo unificado ECE2 para desarrollar nuevos tipos de espectroscopías de REE y RMN de utilidad general para todos los átomos y moléculas. La covariancia según Lorentz de las ecuaciones de campo de esta teoría significa que todas las ecuaciones de la relatividad restringida aplican en un espaciotiempo general que incluye torsion y curvatura. Los nuevos términos de resonancia seexpresan en términos del potencial W de la teoría ECE2, que posee las mismas unidades que el potencial A de la teoría de Maxwell Heaviside.

Palabras clave: teoría del campo unificado ECE2 covariante generalizada, nuevas espectroscopías de REE y RMN.

1. Introducción.

En documentos recientes de esta serie [1-12] la teoría del campo unificado covariante generalizada ECE2 se ha desarrollado en términos de las ecuaciones de relatividad restringida, utilizando covariancia según Lorentz de las ecuaciones de campo de la teoría. Esto constituye un nuevo tipo de covariancia según Lorentz que se produce en un espacio matemático con torsión y curvatura siempre distintas de cero. Los documentos de la teoría ECE2 son UFT313-320, y UFT322-328 en el portal www.aias.us. Se basan en el desarrollo, incluido en el documento UFT313, de la identidad de Bianchi con torsión - la identidad de Jacobi Cartan Evans (JCE). También se basan en nuevas hipótesis que extienden el alcance de la teoría ECE, y en métodos que reducen las ecuaciones de campo a un formato idéntico con las ecuaciones de campo de Maxwell Heaviside (MH). Nótese cuidadosamente que las ecuaciones de campo de la teoría ECE2 son fundamentalmente diferentes de las ecuaciones de campo de MH, porque las primeras se expresan en un espacio con una torsión y una curvatura distintas de cero, y se basan en la geometría de Cartan. De manera que las ecuaciones de campo de la teoría ECE2 pueden desarrollarse para la gravitación y para el electromagnetismo. Las ecuaciones de MH, por otro lado, son ecuaciones de la antigua clase de relatividad restringida, una teoría desarrollada en un espacio matemático sin torsión ni curvatura, el viejo concepto de un espaciotiempo de cuatro dimensiones. El nuevo tipo de relatividad restringida, desarrollado en la teoría ECE2, es muy poderoso, porque puede utilizarse para unificar la teoría de campo y para unificar conceptos de la física en muchas formas diferentes.

En este documento se utiliza la relatividad restringida según la teoría ECE2 para demostrar la existencia de nuevos tipos de resonancia de espín electrónica y resonancia magnética nuclear en todos los materiales. Esto constituye un nuevo tema con gran potencial de desarrollo, tanto a nivel teórico como experimental. Como de costumbre, este documento constituye una breve sinopsis de cálculos detallados y pueden hallarse en las notas de acompañamiento al documento UFT329 publicadas en el portal www.aias.us. La Nota 329(1) considera correcciones numéricas a los hamiltonianos de Sommerfeld y Dirac en el espacio de la teoría ECE2, hamiltonianos que se originan en la ecuación de energía de Einstein según la teoría ECE2 junto con consideraciones de energía potencial. Los cálculos de esta nota se basan en la clase de aproximación gruesa de Dirac, la cual no considera el hamiltoniano que da origen a los nuevos efectos mencionados en este documento. La Nota 329(2) brinda algunos detalles de los hamiltonianos de Sommerfeld y Dirac en tres dimensiones, utilizando coordenadas polares esféricas y las constantes de movimiento definidas en los documentos UFT270 y UFT271. Se definen las ecuaciones del lagrangiano y de Euler Lagrange. La Sección 2 de este documento se basa en las Notas 293(3) - 293(7), en las que se efectúa una cuidadosa y precisa evaluación del hamiltoniano según la teoría ECE2, una evaluación que da como resultado el descubrimiento de nuevas clases de REE y RMN.

En la Sección 3 se calculan algunos niveles de energía del nuevo hamiltoniano, utilizando las funciones de onda hidrogénicas en la primera aproximación. Este método tiene un gran potencial de desarrollo en la química cuántica computacional, utilizando bibliotecas de código contemporáneas y supercomputadoras. En teoría, emergen varios tipos nuevos de espectroscopía de gran utilidad.

2. Nueva REE y RMN.

La nueva resonancia de espín electrónica y resonancia magnética nuclear emergen a partir del hamiltoniano de la relatividad restringida de la teoría ECE2:

$$H = \left(p^2c^2 + m^2c^4\right)^{1/2} + U \tag{1}$$

donde U es la energía potencial, $\underline{p}$ ese momento relativista, m es la masa de la partícula, y c es la velocidad de la luz en el vacío. En el átomo de hidrógeno (H), utilizado como una sencilla ilustración de la nueva teoría, la energía potencial es:

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{2}$$

donde e es la carga eléctrica del protón, y ε_0 es la permitividad en el vacío según unidades del S. I. Aquí, r es la distancia entre el protón y el electrón en el átomo de hidrógeno. El hamiltoniano (1) puede de re-expresarse como:

$$H_0 = H - mc^2 = \frac{p}{m(1+\gamma)} + U \tag{3}$$

en donde:

$$\gamma = \left(1 - \frac{p_0^2}{m^2c^4}\right)^{-1/2} \tag{4}$$

Aquí, γ es el factor de Lorentz definido por:

$$p_0^2 = 2m\left(H_0 - U\right) \tag{5}$$

donde p_0 es el momento clásico de la partícula según el marco de referencia del observador, relacionado con el momento relativista p por:

$$\underline{p} = \gamma\, \underline{p}_0 . \tag{6}$$

Nótese cuidadosamente que la cuantización ocurre a través del momento relativista como sigue:

$$-i\hbar \underline{\nabla}\psi = \underline{p}\psi \tag{7}$$

donde ψ es la función de onda del átomo de hidrógeno. Por lo tanto, la ecuación de onda relativista de la mecánica cuántica se construye a partir de la Ec. (3), a partir de la cual siempre puede utilizarse ya si el operador o la función clásica. Utilizando el operador en el numerador y la función clásica en el denominador produce la siguiente ecuación relativista de la mecánica cuántica:

$$\langle H_0 \rangle = -\hbar^2 c^2 \int \frac{\psi^* \nabla^2 \psi \, d\tau}{m(1+\gamma)} + \int \psi^* U \psi \, d\tau \tag{8}$$

en la que:

$$\underline{p}_0 = m_0 \underline{v}_0 \tag{9}$$

En una primera aproximación:

$$\left(1 - \frac{p_0^2}{m^2 c^2}\right)^{-1/2} \sim 1 + \frac{1}{2} \frac{p_0^2}{m^2 c^2} \tag{10}$$

de manera que los niveles de energía a partir de la Ec. (8) devienen:

$$\langle H_0 \rangle = -\hbar^2 c^2 \int \frac{\psi^* \nabla^2 \psi \, d\tau}{\left(2 + \frac{p_0^2}{2 m^2 c^2}\right) m c^2} + \int \psi^* U \psi \, d\tau . \tag{11}$$

En el límite:

$$H_0 - U \ll m c^2 \tag{12}$$

La Ec. (11) se reduce a los conocidos niveles de energía de la ecuación de Schroedinger

$$\langle H_0 \rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} \int \psi^* \nabla^2 \psi \, d\tau + \int \psi^* U \psi \, d\tau = -\frac{m e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \tag{12a}$$

para el átomo de hidrógeno.

Utilizando:

$$\left(2+\frac{H_0-U}{mc^2}\right)^{-1}=\frac{1}{2}\left(1+\frac{H_0-U}{2mc^2}\right)^{-1}\sim\frac{1}{2}\left(1-\frac{H_0-U}{2mc^2}\right) \tag{13}$$

para:

$$H_0-U \ll 2mc^2 \tag{14}$$

la Ec. (11) deviene:

$$\langle H_0\rangle=\frac{-me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2n^2}+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\int\psi^*\nabla^2\left((H_0-U)\psi\right)d\tau . \tag{15}$$

Hay un corrimiento en los niveles energía del átomo de hidrógeno que es diferente para cada número cuántico principal *n*.

Utilizamos ahora el hecho de que H_0, el hamiltoniano clásico definido por:

$$H_0=-\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2n^2} \tag{16}$$

es una constante de movimiento. Por lo tanto

$$\langle H_0\rangle=-\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2n^2}-\frac{\hbar^2}{4m^2c^4}\int\psi^*\nabla^2(U\psi)d\tau+\frac{\hbar^2H_0}{4m^2c^2}\int\psi^*\nabla^2\psi d\tau . \tag{17}$$

En la primera aproximación puede utilizarse la Ec. (16) como H_0 del lado derecho, de manera que:

$$\langle H_0\rangle=\frac{-me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2n^2}\left(1+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\int\psi^*\nabla^2\psi d\tau\right)-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\int\psi^*\nabla^2(U\psi)d\tau . \tag{18}$$

Se incluyen detalles del cálculo en la nota de acompañamiento 329(3). En esta nota, se muestra que la aproximación típica de Dirac:

$$H \sim E \sim mc^2, \tag{19}$$

$$U \ll E \sim mc^2, \tag{20}$$

conduce a:

$$\langle H_0 \rangle = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\int \psi^* \nabla^2 (U\psi) \tag{21}$$

y omite el siguiente término:

$$\langle H_0 \rangle_1 = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2}\left(\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\int \psi^* \nabla^2 \psi \, d\tau\right). \tag{22}$$

Estos niveles de energía pueden evaluarse suponiendo que las funciones de onda en la primera aproximación son aquellas de la ecuación de Schroedinger. Existen muchas bibliotecas de códigos de química cuántica computacional con los cuales desarrollar un tema más preciso.

Tal como se demostró en detalle en la Nota de acompañamiento 329(4), el nuevo hamiltoniano en la base SU(2) es:

$$H_{01} = -\frac{1}{4m^2c^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\,H_0\,\underline{\sigma}\cdot\underline{p} \tag{23}$$

que conduce a los corrimientos en los niveles de energía:

$$H_{01} = \frac{\hbar^2 H_0}{4m^2c^2}\nabla^2\psi. \tag{24}$$

En la antigua clase de relatividad restringida, desarrollada en un espacio con torsión y curvatura distintos de cero, se expresa el efecto de un campo magnético externo, como se observa en REE y RMN, mediante la prescripción mínima:

$$\underline{p} \longrightarrow \underline{p} - e\underline{A} \tag{25}$$

donde $\underline{A}$ es el vector de potencial. De manera que el hamiltoniano (23) en presencia de un campo magnético deviene:

$$H_{01} = -\frac{H_0}{4m^2c^2}\,\underline{\sigma}\cdot(\underline{p}-e\underline{A})\,\underline{\sigma}\cdot(\underline{p}-e\underline{A}) \tag{26}$$

el cual se cuantiza a

$$H_{01}\psi = -\frac{H_0}{4m^2c^2}\left(-\hbar^2\nabla^2 + e^2A^2 + i\hbar e\left(\underline{\nabla}\cdot\underline{A} + \underline{A}\cdot\underline{\nabla}\right)\right)\psi \tag{27}$$

dando origen a muchos efectos, tal como se describe en las Notas para los documentos UFT250 y UFT252. Tal como se muestra en detalle en la Nota de acompañamiento 329(5), el esquema de cuantización que conduce a las nuevas formas de REE y RMN es:

$$H_{01}\psi = -\frac{H_0}{4m^2c^2}\underline{\sigma}\cdot\left(-i\hbar\underline{\nabla} - e\underline{A}\right)\underline{\sigma}\cdot\left(\underline{p} - e\underline{A}\right)\psi \tag{28}$$

donde $\underline{p}$ es el momento relativista. Tal como se muestra en la nota de acompañamiento 329(6), el hamiltoniano de relevancia es:

$$H_{REE}\psi = -\frac{ie\hbar H_0}{4m^2c^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{\nabla}\underline{\sigma}\cdot\underline{A}\psi. \tag{29}$$

Utilizando el álgebra de Pauli:

$$\underline{\sigma}\cdot\underline{\nabla}\underline{\sigma}\cdot\underline{A} = \underline{\nabla}\cdot\underline{A} + i\underline{\sigma}\cdot\underline{\nabla}\times\underline{A} \tag{30}$$

su parte real y física es:

$$\mathrm{Re}\left(H_{REE}\right)\psi = \frac{e\hbar H_0}{4m^2c^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{B}\psi \tag{31}$$

donde

$$\underline{B} = \underline{\nabla}\times\underline{A} \tag{32}$$

es la densidad de flujo magnético definida en la vieja teoría mediante:

$$\underline{\sigma}\cdot\underline{\nabla}\times\underline{A} = \underline{\sigma}\cdot\underline{B}. \tag{33}$$

Utilizando la Ec. (16) en la primera aproximación, el nuevo hamiltoniano de REE y RMN es:

$$\langle Re(H_{REE})\rangle = \frac{-e^5}{128\pi^2\epsilon_0^2\hbar m c^2 n^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{B} \tag{34}$$

En la teoría ECE2 (UFT317), la densidad de flujo magnético se define mediante:

$$\underline{B} = \underline{\nabla}\times\underline{W} = \underline{\nabla}\times\underline{A} + 2\,\underline{\omega}\times\underline{A} \tag{35}$$

de manera que la prescripción mínima deviene:

$$p^\mu \longrightarrow p^\mu - eW^\mu \tag{36}$$

donde

$$W^\mu = \left(\phi_W, c\underline{W}\right) \tag{37}$$

y:

$$\underline{B} = \underline{\nabla}\times\underline{W} = W^{(0)}\,\underline{R}(\text{espín}) \tag{38}$$

como en el documento UFT317. Por lo tanto, tal como se muestra en detalle en la Nota de acompañamiento 329(7), el nuevo hamiltoniano se define la curvatura de espín como sigue:

$$Re(H_{REE})\psi = \frac{e\hbar H_0 W^{(0)}}{4m^2c^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{R}(\text{espín})\psi. \tag{39}$$

Esto también se cumple para todas las clases de REE, RMN y IRM MRI, las cuales pueden utilizarse para medir a nivel experimental la curvatura de espín según la teoría ECE2.

3. Cálculo de Niveles de Energía.

De acuerdo con la Ec.(18), el valor esperado relativista del hamiltoniano puede aproximarse mediante

$$\langle H_0 \rangle = E_0 + \langle H_0 \rangle_{s-o} + \langle H_0 \rangle_1 \tag{40}$$

donde las tres partes son los eigenvalores de energía no relativistas

$$E_0 = -\frac{e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 n^2 mc^2}, \tag{41}$$

La contribución al espín-órbita de la teoría de Dirac

$$\langle H_0 \rangle_{s-o} = f \int \psi^* \nabla^2 (U\psi)\, d\tau, \tag{42}$$

y la nueva parte adicional

$$\langle H_0 \rangle_1 = -f E_0 \int \psi^* \nabla^2 \psi\, d\tau \tag{43}$$

ambos con el factor

$$f = -\frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \tag{44}$$

Se evalúan las integrales para las funciones de onda del átomo de hidrógeno en tres dimensiones, y los detalles pueden consultarse en los documentos de la serie UFT 250 y 308. El operador de Laplace en tres dimensiones con coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) es

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\operatorname{sen}\theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2}. \tag{45}$$

n	l	*Integral* $\langle H_0 \rangle_{s\text{-}o}$	*Integral* $\langle H_0 \rangle_1$
1	0	$-Z^4/a_0^3$	$-Z^2/a_0^2$
2	0	$-Z^4/16a_0^3$	$-Z^2/4a_0^2$
2	1	$5Z^4/48a_0^3$	$-Z^2/4a_0^2$
3	0	$-Z^4/81a_0^3$	$-Z^2/9a_0^2$
3	1	$Z^4/27a_0^3$	$-Z^2/9a_0^2$
3	2	$7Z^4/405a_0^3$	$-Z^2/9a_0^2$

Tabla 1: Corrimientos de energía de las Integrales (42) y (43).

Los parámetros adicionales que aparecen en las funciones de onda son el número atómico Z y el radio de Bohr a_0. Se supuso la energía de Coulomb como

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}. \tag{46}$$

Para el átomo de hidrógeno tenemos $Z = 1$, mientras que para valores mayoers de Z éstas son aproximaciones muy groseras.

Los valores de las integrales que aparecen en las Ecs.(42,43) se han calculado en forma analítica y se incluyen en la Tabla 1. Los términos ordinarios de espín-órbita dependen de los números cuánticos n y l, y no de m_l. Sorprendentemente, el término adicional $\langle H_0 \rangle_1$ no depende del número cuántico angular l, sino solamente del número cuántico principal n. Obviamente el resultado contiene un factor $1/n^2$. Debiera de observarse que este factor también aparece en E_0, pero no ha sido multiplicado aquí para los valores de las integrales. Corridas de prueba con un operador de Laplace (45) sin partes angulares mostró que $\langle H_0 \rangle_1$ se vuelve entonces dependiente del número cuántico l. En espectroscopías sensibles al ángulo esperamos que el nuevo término demuestre una dependencia respecto de l.

Los valores numéricos de corrimiento de energía, expresados en unidades de eV, se incluyen en la Tabla 2. Las correcciones $<H_0>_1$ son más pequeñas que las del término de Dirac de acoplamiento espín-órbita. No obstante, el estado 1*s* sufre un corrimiento significativo a causa del nuevo término. Este corrimiento es de un orden de magnitud de 10^{-4} eV y debiera de ser observable por espectroscopía. A partir de la Tabla 1 se observa que los nuevos efectos crecen con el número atómico Z^2, mientras que los términos de espín-órbita ordinarios crecen con Z^4. Por lo tanto, estas correcciones resultarán menos significativas para elementos más pesados.

n	l	E_0	$<H_0>_{s\text{-}o}$	$<H_0>_1$	$<H_0>$
1	0	-13.6066919	0.0003623	0.0001811	-13.6051485
2	0	- 3.4014230	0.0000226	0.0000113	-3.4013890
2	1	- 3.4014230	-0.0000075	0.0000038	-3.4014268
3	0	- 1.5117435	0.0000045	0.0000022	-1.5117368
3	1	- 1.5117435	-0.0000045	0.0000012	-1.5117468
3	2	- 1,5117435	-0.0000009	0.0000004	-1.5117440

Tabla 2: Corrimientos de energía de las Ecs.(42, 43) y energías totales en eV.

Agradecimientos.

Se agradece al Gobierno Británico por la Pensión Civil Vitalicia, y al equipo técnico de AIAS y otros por muchas discusiones interesantes. Se agradece a Dave Burleigh por el mantenimiento, programas de retroalimentación y publicaciones en el portal www.aias.us, a Alex Hill por las traducciones y lecturas en idioma castellano y a Robert Cheshire por las lecturas en idioma inglés.

Referencias bibliográficas.

[1] M .W. Evans, H. Eckardt, D. W. Lindstrom y S. J. Crothers, "The Principles of ECE Theory" (UFT281 - UFT288 en el portal www.aias.us y en New Generation Publishing, London, en prep.)
[2] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, "Generally Covariant Unified Field Theory (Abramis 2005 - 2011 en siete volúmenes, de libre acceso como los documentos relevantes de la serie UFT).
[3] M .W. Evans, S. J. Crothers, H. Eckardt y K. Pendergast, "Criticisms of the Einstein Field Equation" (Cambridge International Science Publishing, CISP, 2010, de libre acceso como el documento UFT301).
[4] M .W. Evans, Ed. J. Found. Phys. Chem. (CISP 2011, de libre acceso como los documentos relevantes de la serie UFT).
[5] M. W. Evans, Ed. "Definitive Refutations of the Einsteinian General Relativity" (edición especial de la referencia [4], de libre acceso en el portal www.aias.us como los documentos relevantes de la serie UFT).
[6] L. Felker, "The Evans Equations of Unified Field Theory" (Abramis 2007, UFT302, y la traducción al idioma castellano por Alex Hill en el portal www.aias.us).
[7] H. Eckardt, "The ECE Engineering Model" (UFT303, recolección de ecuaciones).
[8] M. W. Evans, "Collected Scientometrics" (UFT307 y sección de Estadísticas Filtradas en el portal www.aias.us, y en New Generation Publishing, 2015).
[9] M .W. Evans y L. B. Crowell, "Classical and Quantum Electrodynamics and the B(3) Field" (World Scientific 2001, de libre acceso en la sección de Omnia Opera en el portal www.aias.us).
[10] M. W. Evans y S. Kielich, eds., "Modern Nonlinear Optics" (Wiley Interscience, Nueva York, 1992, 1993, 1997, y 2001, en encuadernación dura, blanda y como libro e) en dos ediciones y seis volúmenes.
[11] M .W. Evans y J. - P. Vigier, "The Enigmatic Photon" (Kluwer, 1994 a 2002, en cinco volúmenes de encuadernación dura y blanda, de libre acceso en la sección Omnia Opera del portal www.aias.us).
[12] M .W. Evans y A. A. Hasanein, "The Photomagneton in Quantum Field Theory" (World Scientific 1994).